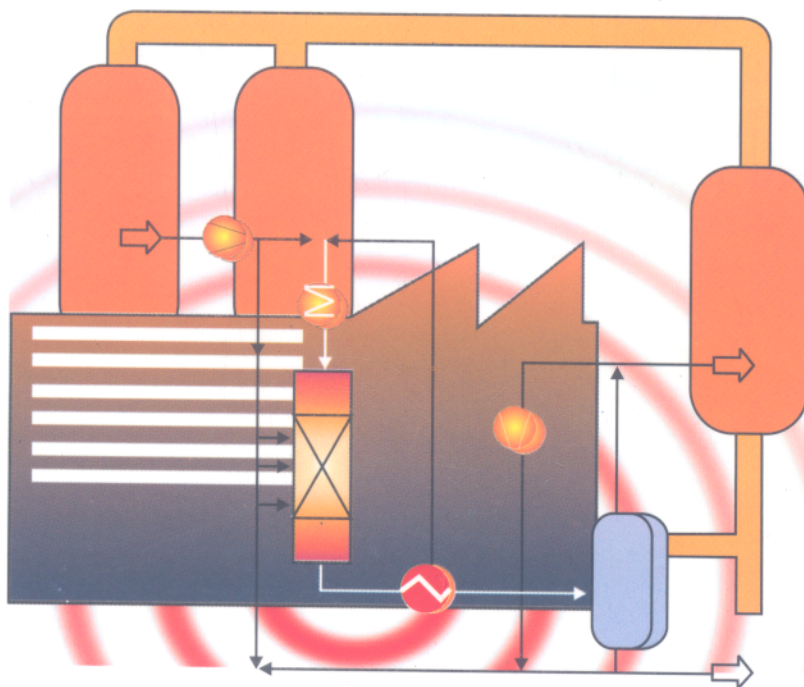


PHẠM HÙNG VIỆT

# BÀI TẬP HÓA KỸ THUẬT

Tập 1



NHÀ XUẤT BẢN KHOA HỌC VÀ KỸ THUẬT

PHẠM HÙNG VIỆT

# **BÀI TẬP HÓA KỸ THUẬT**

**TẬP 1**

*(In lần thứ hai)*



**NHÀ XUẤT BẢN KHOA HỌC VÀ KỸ THUẬT  
HÀ NỘI**

## LỜI NÓI ĐẦU

Môn học Hóa Kỹ thuật đã được đưa vào giảng dạy hơn 20 năm qua tại Khoa Hóa học, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà Nội. Bên cạnh giáo trình lý thuyết, các bài tập minh họa và chương trình thực tập là sự bổ sung hữu ích giúp cho sinh viên có thể hiểu thấu đáo hơn những vấn đề lý thuyết. Tài liệu "Bài tập Hóa Kỹ thuật" đầu tiên được xuất bản trên cơ sở tham khảo cuốn sách "Aufgaben zur technischen Chemie" (Kripylo.P et al.) do các tác giả Nguyễn Xuân Dũng, Phạm Nguyên Chương, Nguyễn Bích Hà, Phạm Hùng Việt và Nguyễn Phương Tùng biên soạn năm 1978. Sau thời gian giảng dạy hơn 10 năm, được sự đóng góp ý kiến của các bạn đồng nghiệp, sinh viên, đồng thời khai thác thêm những thông tin cập nhật từ nhiều cuốn sách và giáo trình về hóa kỹ thuật được giảng dạy trong các trường đại học danh tiếng ở Mỹ, Anh, Đức và Thụy Sĩ, tác giả đã tập hợp và đề xuất các dạng bài tập đặc trưng cho những phương pháp khác nhau thường được áp dụng trong kỹ thuật tách chất và kỹ thuật tiến hành phản ứng hóa học để xây dựng cuốn "Bài tập Hóa Kỹ thuật" mới.

Giáo trình "Bài tập Hóa kỹ thuật" được xuất bản lần này được chia làm hai phần chính: kỹ thuật tách chất và kỹ thuật tiến hành phản ứng hóa học.

- Phần "Bài tập kỹ thuật tách chất" bao gồm 4 chương: chưng cất, chiết lỏng - lỏng, hấp thụ, lọc kỹ thuật.
- Phần "Bài tập kỹ thuật tiến hành phản ứng hóa học" bao gồm 6 chương: động học của phản ứng đồng thể, thiết bị phản ứng lý tưởng đơn giản, thiết bị phản ứng có thể tích thay đổi, hệ thống các thiết bị phản ứng, thiết bị phản ứng quay vòng và phản ứng tự xúc tác, bài toán tối ưu hóa.

Phần đầu cuốn sách có cung cấp bảng chuyển đổi đơn vị giữa hệ đo Anh, Mỹ và hệ SI.

Mỗi chương đều được cấu trúc thành các mục theo thứ tự như sau:

- Tóm tắt lý thuyết và các công thức, phương trình cơ bản tương ứng.
- Một số bài tập đặc trưng minh họa kèm theo lời giải mẫu chi tiết.
- Một số bài tập đã được lựa chọn tiêu biểu để người đọc tự giải (đáp số và chỉ dẫn ngắn gọn về cách giải của từng bài được trình bày ở cuối sách).

Một số chương đã được trình bày trong giáo trình lý thuyết "Hóa Kỹ thuật" như phương pháp tách chất bằng màng, trao đổi ion hay thiết bị phản ứng cho các hệ phản ứng phức hợp chưa được đề cập tới trong cuốn bài tập lần này, vì thời lượng dành cho các chương này trong giáo trình lý thuyết còn khá khiêm tốn.

Hy vọng rằng cuốn sách này sẽ là một tài liệu hữu ích cho các sinh viên ngành Hóa, đồng thời có thể hỗ trợ cho các cán bộ giảng dạy trong các giờ chữa bài tập và xemina. Một số phần của cuốn sách cũng có thể được sử dụng làm tài liệu tham khảo cho học viên cao học và các sinh viên ngành Công nghệ Hóa học.

Tác giả bày tỏ lòng biết ơn về sự cộng tác và đóng góp ý kiến của các anh chị và các bạn đồng nghiệp thuộc Bộ môn Công nghệ Hóa học, Khoa Hóa học, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên đã cùng giảng dạy, chia sẻ kinh nghiệm trong quá trình biên soạn giáo trình này. Tác giả xin chân thành cảm ơn các cộng tác viên Dương Hồng Anh, Lê Thị Thảo, Dương Thu Hiền, Hoàng Văn Hà và Nguyễn Thị Ánh Hường đã đóng vai trò trợ lý giảng dạy, chữa bài cho sinh viên hoặc giúp đỡ khai thác các bài tập mới, giải bài tập theo nhiều cách khác nhau cũng như giúp đỡ rất hiệu quả trong việc chế bản cuốn bài tập này.

Như đã trình bày, nội dung của cuốn sách chắc chưa thể đáp ứng được hết nhu cầu tìm hiểu các dạng bài tập Hóa Kỹ thuật cũng như không tránh khỏi các sai sót trong chế bản, tác giả rất mong nhận được ý kiến đóng góp của các anh chị, các bạn đồng nghiệp và các lớp sinh viên để có thể tiếp tục hoàn chỉnh, nâng cao chất lượng của giáo trình và phục vụ bạn đọc được tốt hơn.

Hà Nội, 2 - 2002

**Tác giả**



## MỤC LỤC

|                                                                              | Trang |
|------------------------------------------------------------------------------|-------|
| Lời nói đầu                                                                  | 3     |
| Bảng chuyển đổi đơn vị Anh – Mỹ sang hệ SI                                   | 9     |
| <b>PHẦN I: KỸ THUẬT TÁCH CHẤT</b>                                            |       |
| Giải thích các ký hiệu trong phần I                                          | 12    |
| <b>CHƯƠNG 1: PHƯƠNG PHÁP CHUNG CẤT</b>                                       |       |
| 1.1. Cân bằng lỏng-hơi                                                       | 15    |
| 1.2. Phương pháp chung cất hỗn hợp gồm hai cấu tử                            | 18    |
| 1.2.1. Quá trình chưng cất phân đoạn                                         | 19    |
| 1.2.2. Số đĩa lý thuyết cần thiết cho một cột tách                           | 20    |
| * Tính số đĩa lý thuyết bằng phương pháp Lewis-Sorel                         | 20    |
| * Tính số đĩa lý thuyết theo phương pháp McCabe-Thiele                       | 25    |
| 1.2.3. Giao điểm của hai đường làm việc                                      | 27    |
| 1.2.4. Tầm quan trọng của tỉ số hồi lưu                                      | 30    |
| 1.2.5. Tính tỉ số hồi lưu cực tiểu $R_m$                                     | 31    |
| 1.2.6. Phương trình Underwood-Fenske                                         | 32    |
| 1.2.7. Tính số đĩa lý thuyết khi dòng hồi lưu hoàn toàn. Phương trình Fenske | 33    |
| 1.3. Hỗn hợp nhiều cấu tử                                                    | 35    |
| 1.3.1. Cân bằng lỏng-hơi                                                     | 35    |
| 1.3.2. Thành phần của nguyên liệu và của sản phẩm                            | 35    |
| 1.3.3. Cấu tử nhẹ và cấu tử nặng chủ đạo                                     | 36    |
| 1.3.4. Tính toán số đĩa lý thuyết cần thiết cho một yêu cầu tách             | 36    |
| 1.3.5. Tỉ số hồi lưu cực tiểu                                                | 42    |
| 1.3.6. Xác định tỉ số hồi lưu cực tiểu theo phương pháp Underwood            | 42    |
| 1.3.7. Tính số đĩa lý thuyết khi dòng hồi lưu hoàn toàn                      | 44    |
| 1.3.8. Mối quan hệ giữa số đĩa lý thuyết cực tiểu và tỉ số hồi lưu cực tiểu  | 45    |
| <b>BÀI TẬP CHƯƠNG 1</b>                                                      | 46    |
| <b>CHƯƠNG 2: PHƯƠNG PHÁP HẤP THỤ</b>                                         |       |
| 2.1. Các điều kiện cân bằng giữa pha lỏng và pha khí                         | 55    |
| 2.2. Cơ chế hấp thụ                                                          | 55    |
| 2.2.1. Lý thuyết hai lớp                                                     | 55    |
| 2.2.2. Tốc độ hấp thụ                                                        | 56    |

|                                                                                                               |     |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 2.3. Hấp thụ kết hợp với phản ứng hóa học                                                                     | 59  |
| 2.4. Cột hấp thụ kiểu đĩa                                                                                     | 61  |
| <b>BÀI TẬP CHƯƠNG 2</b>                                                                                       | 67  |
| <b>CHƯƠNG 3: PHƯƠNG PHÁP CHIẾT LỎNG-LỎNG</b>                                                                  |     |
| 3.1. Giới thiệu chung                                                                                         | 71  |
| 3.2. Các điều kiện cân bằng                                                                                   | 72  |
| 3.3. Tính số bậc chiết cần thiết để đáp ứng một yêu cầu chiết                                                 | 76  |
| 3.3.1. Tính số bậc chiết trong hệ dung môi tan một phần vào nhau trong các hệ thống chiết xuôi dòng           | 76  |
| 3.3.2. Tính số bậc chiết đối với hệ dung môi hoàn toàn không tan vào nhau trong các hệ thống chiết xuôi dòng  | 78  |
| 3.3.3. Tính số bậc chiết đối với hệ dung môi hoàn toàn không tan vào nhau trong các hệ thống chiết ngược dòng | 80  |
| 3.3.4. Tính số bậc chiết đối với hệ các dung môi tan vào nhau một phần trong các hệ thống chiết ngược dòng    | 81  |
| <b>BÀI TẬP CHƯƠNG 3</b>                                                                                       | 87  |
| <b>CHƯƠNG 4: TÁCH CHẤT BẰNG PHƯƠNG PHÁP LỌC</b>                                                               |     |
| 4.1. Lý thuyết của quá trình lọc                                                                              | 93  |
| 4.1.1. Mối quan hệ giữa độ dày của bánh lọc và thể tích dịch lọc                                              | 96  |
| 4.1.2. Dòng chất lỏng đi qua lớp áo lọc                                                                       | 98  |
| 4.1.3. Dòng dịch lọc đi qua áo lọc và bánh lọc                                                                | 98  |
| 4.1.4. Các bánh lọc có thể nén được                                                                           | 99  |
| 4.1.5. Rửa bánh lọc                                                                                           | 99  |
| 4.2. Các loại thiết bị lọc                                                                                    | 100 |
| 4.2.1. Bộ lọc nén                                                                                             | 100 |
| 4.2.2. Các bộ lọc lá                                                                                          | 101 |
| 4.2.3. Bộ lọc trống                                                                                           | 101 |
| 4.3. Lọc bằng máy ly tâm                                                                                      | 102 |
| 4.4. Một số bài tập đặc thù với kỹ thuật lọc                                                                  | 104 |
| <b>BÀI TẬP CHƯƠNG 4</b>                                                                                       | 114 |
| <b>ĐÁP SỐ VÀ HƯỚNG DẪN PHẦN I</b>                                                                             | 119 |

## **PHẦN II: KỸ THUẬT TIẾN HÀNH PHẢN ỨNG HÓA HỌC**

|                                                             |     |
|-------------------------------------------------------------|-----|
| Giải thích các ký hiệu trong phần II                        | 129 |
| <b>CHƯƠNG 5: ĐỘNG HỌC CỦA PHẢN ỨNG ĐỒNG THỂ</b>             |     |
| 5.1. Tốc độ phản ứng đồng thể                               | 141 |
| 5.2. Phân loại các phản ứng đồng thể                        | 141 |
| 5.2.1. Phản ứng đơn giản và phức tạp                        | 141 |
| 5.2.2. Phản ứng cơ bản và không cơ bản                      | 142 |
| 5.3. Quan điểm động học về cân bằng của các phản ứng cơ bản | 142 |
| * Phân tử số và bậc của phản ứng                            | 143 |
| * Hằng số tốc độ của phản ứng k                             | 143 |

|                                                                                      |     |
|--------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 5.4. Các mô hình động học đối với các phản ứng không cơ bản                          | 144 |
| 5.5. Ảnh hưởng của nhiệt độ đến tốc độ phản ứng                                      | 147 |
| 5.5.1. Định luật Arrhenius về sự ảnh hưởng của nhiệt độ đến tốc độ phản ứng          | 147 |
| 5.5.2. Ảnh hưởng của nhiệt độ đến tốc độ phản ứng theo quan điểm nhiệt động học      | 148 |
| 5.5.3. Ảnh hưởng của nhiệt độ đến tốc độ phản ứng theo thuyết va chạm                | 148 |
| 5.5.4. Ảnh hưởng của nhiệt độ đến tốc độ phản ứng theo thuyết trạng thái chuyển tiếp | 150 |
| * Xét sự khác nhau giữa thuyết va chạm và thuyết trạng thái chuyển tiếp              | 151 |
| * So sánh các lý thuyết với định luật Arrhenius                                      | 152 |
| BÀI TẬP CHƯƠNG 5                                                                     | 153 |
| CHƯƠNG 6: CÁC THIẾT BỊ PHẢN ỨNG LÝ TƯỞNG ĐƠN GIẢN                                    |     |
| 6.1. Thiết bị phản ứng khuấy lý tưởng gián đoạn (BR)                                 | 161 |
| 6.2. Thiết bị phản ứng khuấy lý tưởng liên tục (IMR)                                 | 169 |
| 6.3. Thiết bị phản ứng ống dòng (PFR)                                                | 173 |
| BÀI TẬP CHƯƠNG 6                                                                     | 177 |
| CHƯƠNG 7: THIẾT BỊ PHẢN ỨNG CÓ THỂ TÍCH THAY ĐỔI                                     |     |
| 7.1. Thiết bị phản ứng khuấy lý tưởng gián đoạn (BR)                                 | 181 |
| 7.2. Thiết bị phản ứng khuấy lý tưởng liên tục (IMR)                                 | 185 |
| 7.3. Thiết bị phản ứng ống dòng (PFR)                                                | 188 |
| BÀI TẬP CHƯƠNG 7                                                                     | 197 |
| CHƯƠNG 8: HỆ THỐNG CÁC THIẾT BỊ PHẢN ỨNG                                             |     |
| 8.1. Hệ thống các thiết bị IMR                                                       | 203 |
| 8.1.1. Hệ thống các thiết bị IMR có thể tích bằng nhau mắc nối tiếp                  | 203 |
| 8.1.2. Hệ thống các thiết bị IMR có thể tích khác nhau                               | 209 |
| 8.2. Hệ thống các thiết bị PFR                                                       | 216 |
| 8.3. Hệ thống gồm các thiết bị IMR và PFR                                            | 218 |
| BÀI TẬP CHƯƠNG 8                                                                     | 221 |
| CHƯƠNG 9: THIẾT BỊ PHẢN ỨNG QUAY VÒNG VÀ PHẢN ỨNG TỰ XÚC TÁC                         |     |
| 9.1. Thiết bị phản ứng quay vòng                                                     | 225 |
| 9.2. Phản ứng tự xúc tác                                                             | 231 |
| 9.2.1. Đối với thiết bị phản ứng không quay vòng                                     | 233 |
| 9.2.2. Đối với thiết bị phản ứng quay vòng                                           | 234 |
| BÀI TẬP CHƯƠNG 9                                                                     | 239 |

|                                            |     |
|--------------------------------------------|-----|
| CHƯƠNG 10: BÀI TOÁN TỐI ƯU HÓA             |     |
| Các bài toán kinh tế                       | 241 |
| 10.1. Thiết bị phản ứng lý tưởng gián đoạn | 241 |
| 10.2 Thiết bị lý tưởng liên tục            | 242 |
| BÀI TẬP CHƯƠNG 10                          | 250 |
| ĐÁP SỐ VÀ HƯỚNG DẪN PHẦN II                | 253 |
| TÀI LIỆU THAM KHẢO                         | 269 |

## BẢNG CHUYỂN ĐỔI ĐƠN VỊ ANH - MỸ SANG HỆ SI

### Khối lượng

|       |          |
|-------|----------|
| 1 lb  | 0,454 kg |
| 1 ton | 1016kg   |

### Độ dài

|        |          |
|--------|----------|
| 1 in   | 25,4 mm  |
| 1 ft   | 0,305 m  |
| 1 mile | 1,609 km |

### Thời gian

|        |         |
|--------|---------|
| 1 phút | 60 s    |
| 1 giờ  | 3,6 ks  |
| 1 ngày | 86,4 ks |
| 1 năm  | 31,5 Ms |

### Diện tích

|                   |                       |
|-------------------|-----------------------|
| 1 in <sup>2</sup> | 645,2 mm <sup>2</sup> |
| 1 ft <sup>2</sup> | 0,093 m <sup>2</sup>  |

### Thể tích

|                   |                          |
|-------------------|--------------------------|
| 1 in <sup>3</sup> | 16.387,1 mm <sup>3</sup> |
| 1 ft <sup>3</sup> | 0,0283 m <sup>3</sup>    |
| 1 UK gal          | 4546 cm <sup>3</sup>     |
| 1 US gal          | 3786 cm <sup>3</sup>     |

### Lực

|        |                    |
|--------|--------------------|
| 1 pdl  | 0,138 N            |
| 1 lb   | 4,45 N             |
| 1 dyne | 10 <sup>-5</sup> N |

### Năng lượng

|         |                    |
|---------|--------------------|
| 1 ft lb | 1,36 J             |
| 1 cal   | 4,187 J            |
| 1 erg   | 10 <sup>-7</sup> J |
| 1 Btu   | 1,055 kJ           |

### Công suất

|         |         |
|---------|---------|
| 1 h.p.  | 745 W   |
| 1 Btu/h | 0,293 W |

### Áp suất

|                      |                         |
|----------------------|-------------------------|
| 1 lb/in <sup>2</sup> | 6,895 kN/m <sup>2</sup> |
| 1 atm                | 101,3 kN/m <sup>2</sup> |
| 1 bar                | 100 kN/m <sup>2</sup>   |
| 1 ft water           | 2,99 N/m <sup>2</sup>   |
| 1 in water           | 249 N/m <sup>2</sup>    |
| 1 in Hg              | 3,39 kN/m <sup>2</sup>  |
| 1 mm Hg              | 133 N/m <sup>2</sup>    |

### Độ nhớt

|                      |                                    |
|----------------------|------------------------------------|
| 1 P                  | 0,1 N s/m <sup>2</sup>             |
| 1 lb/ft h            | 0,414 mN s/m <sup>2</sup>          |
| 1 stoke              | 10 <sup>-4</sup> m <sup>2</sup> /s |
| 1 ft <sup>2</sup> /h | 0,258 cm <sup>2</sup> /s           |

### Dòng khối lượng

|                        |                          |
|------------------------|--------------------------|
| 1 lb/h                 | 0,126 g/s                |
| 1 ton/h                | 0,282 kg/s               |
| 1 lb/h ft <sup>2</sup> | 1,356 g/s m <sup>2</sup> |

### Nhiệt lượng

|                            |                          |
|----------------------------|--------------------------|
| 1 Btu/h ft <sup>2</sup>    | 3,155 W/m <sup>2</sup>   |
| 1 Btu/h ft <sup>2</sup> °F | 5,678 W/m <sup>2</sup> K |
| 1 Btu/lb                   | 2,326 kJ/kg              |
| 1 Btu/lb °F                | 4,187 kJ/kg K            |
| 1 Btu/h ft °F              | 1,731 W/m K              |

### Năng lượng

|         |          |
|---------|----------|
| 1 kWh   | 3,6 MJ   |
| 1 therm | 106,5 MJ |

### Nhiệt dung riêng

|                       |                         |
|-----------------------|-------------------------|
| 1 Btu/ft <sup>3</sup> | 37,26 kJ/m <sup>3</sup> |
| 1 Btu/lb              | 2,326 kJ/kg             |

### Tỷ trọng

|                      |                         |
|----------------------|-------------------------|
| 1 lb/ft <sup>3</sup> | 16,02 kg/m <sup>3</sup> |
|----------------------|-------------------------|

**PHẦN I**

# **KỸ THUẬT TÁCH CHẤT**



## GIẢI THÍCH CÁC KÝ HIỆU TRONG PHẦN I

|                                  |                                                                                         |
|----------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------|
| A, B, C                          | Dung môi; chương 3                                                                      |
| A, B, C                          | Cấu tử A, B, C hoặc các hằng số; chương 1                                               |
| A                                | Diện tích của bánh lọc, $m^2$ ; chương 4                                                |
| $C_i$                            | Nồng độ trong lòng pha lỏng ở bề mặt phân cách pha, mol/l                               |
| $C_L$                            | Nồng độ trong lòng pha lỏng, mol/l                                                      |
| D                                | Lượng sản phẩm lấy ra ở đầu cột, kmol                                                   |
| e                                | Độ rỗng                                                                                 |
| F                                | Nguyên liệu, kmol                                                                       |
| $G_m$                            | Tốc độ dòng tính theo đơn vị mol trên một đơn vị diện tích chất rắn                     |
| H                                | Hằng số Henry                                                                           |
| $H_i$                            | Entanpi nguyên liệu chưa sôi, kJ/mol                                                    |
| $H_{is}$                         | Entanpi nguyên liệu tại nhiệt độ sôi, kJ/mol                                            |
| $K'$                             | Hằng số phân bố                                                                         |
| $k''_G, k''_L$<br>$K''_G, K''_L$ | Các hệ số chuyển pha được xác định theo phân số mol                                     |
| $k_G, k_L$                       | Hệ số pha khí và pha lỏng                                                               |
| $K_G, K_L$                       | Hệ số tổng pha khí và pha lỏng                                                          |
| $l$                              | Độ dày của bánh lọc, mm                                                                 |
| $L_m$                            | Tốc độ dòng tính theo đơn vị mol trên đơn vị diện tích chất lỏng                        |
| $L_n$                            | Lượng chất lỏng từ đĩa n đi xuống, mol/s                                                |
| n                                | Số thứ tự đĩa tính từ đỉnh cột xuống                                                    |
| $n_i$                            | Số mol cấu tử i, mol                                                                    |
| $p_{0i}$                         | Áp suất hơi bão hòa của cấu tử i, kN/m <sup>2</sup>                                     |
| $P_A$                            | Áp suất hơi riêng phần của cấu tử A trong pha khí, kN/m <sup>2</sup>                    |
| $P_G$                            | Áp suất riêng phần trong khối khí, kN/m <sup>2</sup>                                    |
| $P_i$                            | Áp suất hơi riêng phần của cấu tử i tại hỗn hợp có thành phần $x_i$ , kN/m <sup>2</sup> |
| $P_i$                            | Áp suất riêng phần trong khối khí ở bề mặt phân cách pha, kN/m <sup>2</sup>             |
| q                                | Tỉ số giữa nhiệt hoá hơi và nhiệt chuyển pha của một mol nguyên liệu                    |
| R                                | Tỉ số hồi lưu                                                                           |
| $R_m$                            | Tỉ số hồi lưu cực tiểu                                                                  |
| S                                | Bề mặt đặc trưng của các tiểu phân                                                      |
| s                                | Tổng số đĩa lý thuyết trong cột                                                         |
| T                                | Nhiệt độ, K                                                                             |
| t                                | Nhiệt độ, °C                                                                            |
| u                                | Tốc độ lọc                                                                              |
| V                                | Thể tích của dịch lọc đi qua trong thời gian t, l                                       |
| $V_n$                            | Lượng hơi từ đĩa n đi lên, mol/s                                                        |

|            |                                                       |
|------------|-------------------------------------------------------|
| W          | Lượng sản phẩm lấy ra ở đáy cột, kmol                 |
| X          | Nồng độ dịch bã, %mol                                 |
| x          | Số phần mol của cấu tử được hấp thụ trong pha lỏng    |
| $x_i$      | Phần số mol của cấu tử i ở pha lỏng                   |
| Y          | Nồng độ dịch chiết, %mol                              |
| y          | Số phần mol của cấu tử được hấp thụ trong pha khí     |
| $y_i$      | Phần số mol của cấu tử i ở pha hơi                    |
| $\alpha$   | Độ bay hơi tương đối                                  |
| $\mu$      | Độ nhớt của dịch lọc                                  |
| $\beta$    | Hệ số chọn lọc                                        |
| $\lambda$  | Nhiệt chuyển pha của hơi, kJ/kmol                     |
| $\rho$     | Tỉ trọng của dịch lọc, g/cm <sup>3</sup>              |
| $\Delta P$ | Hiệu số chênh lệch của áp suất lọc, kN/m <sup>2</sup> |
| $\rho_s$   | Khối lượng riêng của bánh lọc, g/cm <sup>3</sup>      |

# CHƯƠNG 1

## PHƯƠNG PHÁP CHUNG CẤT

Việc tách các cấu tử trong một hỗn hợp lỏng là một trong các quá trình quan trọng của công nghiệp hóa học và dầu mỏ. Chung cất là một phương pháp thường được sử dụng nhất để thực hiện nhiệm vụ này.

### 1.1. Cân bằng lỏng-hơi

Để xác định các thông số của quá trình chung cất, cần phải có các dữ liệu về cân bằng lỏng-hơi của hệ chất cần tách ở áp suất xác định. Điều kiện để một hỗn hợp có thể tách được bằng phương pháp chung cất là thành phần của pha hơi và pha lỏng tương ứng phải khác nhau (đường ngưng tụ và đường sôi phải khác nhau, hình 1.1).

Có thể dễ dàng tính toán cân bằng lỏng-hơi ở dung dịch lý tưởng, nghĩa là chúng thỏa mãn định luật Raoult.

$$x_i = \frac{p_i}{p_{0i}} \quad (1.1)$$

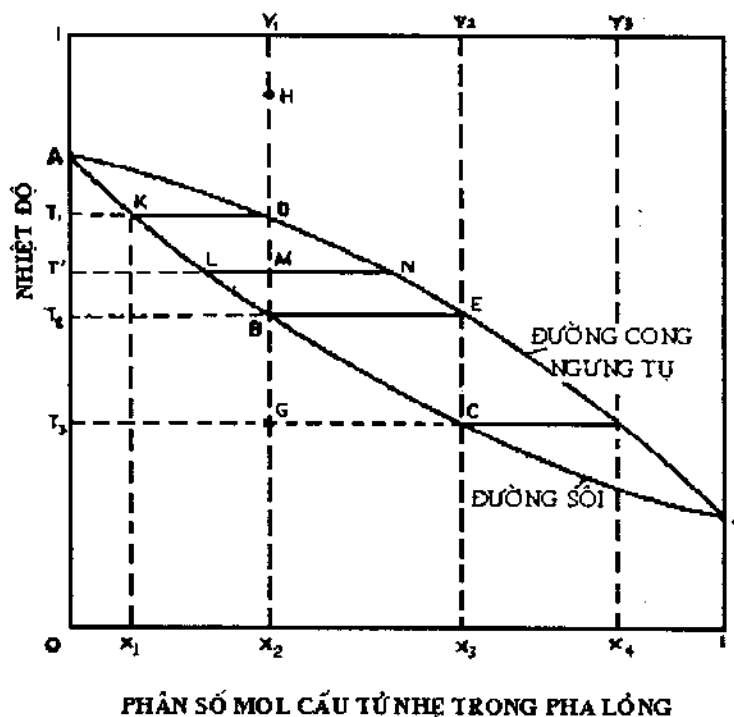
$$x_i = \frac{n_i}{\sum n_i} \quad (1.2)$$

trong đó:

$x_i$  : phân số mol của cấu tử  $i$  ở pha lỏng;

$p_i$  : áp suất hơi riêng phần của cấu tử  $i$  tại hỗn hợp có thành phần  $x_i$ ;

$p_{0i}$  : áp suất hơi bão hoà của cấu tử  $i$ .



**Hình 1.1:** Đường cong cân bằng lỏng-hơi của hệ gồm hai cấu tử.

Đối với hỗn hợp hai cấu tử cân bằng lỏng-hơi ở điều kiện đẳng áp có thể biểu diễn một cách đơn giản qua các giản đồ  $T/x$  và  $y/x$ .

Giản đồ đẳng áp của hệ hai cấu tử lý tưởng được xây dựng từ phương trình áp suất hơi của hệ hai cấu tử.

Phương trình Clausius - Clapayron:

$$\lg p = A - \frac{B}{T} \quad (1.3)$$

$$\lg p = A - \frac{\Delta_v H}{2,303 RT}$$

Phương trình Rankine - Dupré:

$$\lg p = A - \frac{B}{T} + C \lg T \quad (1.4)$$

Phương trình Antoine:

$$\lg p = A - \frac{B}{C+t} \quad (t, ^\circ\text{C}) \quad (1.5)$$

Việc tính toán giản đồ T/x cũng như y/x bắt đầu từ việc xác định nhiệt độ sôi của hai cấu tử nguyên chất dưới áp suất cho trước.  $T_{02}$  là nhiệt độ sôi tại  $x = 0$ , còn  $T_{01}$  là nhiệt độ sôi tại  $x = 1$ . Trong khoảng giữa hai nhiệt độ này có thể tính được áp suất hơi tương ứng của hai cấu tử.

Áp dụng định luật Raoult suy ra:

$$p_1 = x_1 p_{01}$$

$$p_2 = x_2 p_{02}$$

Từ định luật Dalton:

$$p_1 = y_1 p$$

$$p_2 = y_2 p$$

$$p = \sum p_i$$

Suy ra:

$$x_1 p_{01} + x_2 p_{02} = x_1 p_{01} + (1 - x_1) p_{02} = p$$

$$\Rightarrow x_1 = \frac{p - p_{02}}{p_{01} - p_{02}} \quad (1.6)$$

$$y_1 = x_1 \frac{p_{01}}{p} \quad (1.7)$$

### \* Độ bay hơi tương đối

Mối quan hệ giữa thành phần hơi  $y_A$  và thành phần lỏng  $x_A$  tại trạng thái cân bằng có thể được biểu diễn theo một cách khác, cách biểu diễn này đặc biệt hiệu quả trong các tính toán về quá trình chưng cất. Nếu như tỉ số giữa áp suất hơi riêng phần và phân số mol của cấu tử trong hỗn hợp ở trạng thái lỏng được định nghĩa như độ bay hơi của cấu tử đó thì:

$$\text{Độ bay hơi của cấu tử A} = \frac{p_A}{x_A}$$

$$\text{Độ bay hơi của cấu tử B} = \frac{p_B}{x_B}$$

Tỉ số của độ bay hơi của hai cấu tử được định nghĩa là độ bay hơi tương đối của hai cấu tử. Như vậy, độ bay hơi tương đối  $\alpha$  của hai cấu tử được xác định:

$$\alpha = \frac{p_A x_B}{x_A p_B} \quad (1.8)$$

Thay  $p_A$  bằng  $p y_A$  và  $p_B$  bằng  $p y_B$  vào phương trình trên nhận được:

$$\frac{y_A}{y_B} = \alpha \frac{x_A}{x_B} \quad (1.9)$$

Phương trình này cho ta biết mối quan hệ về thành phần của cấu tử A và cấu tử B trong pha hơi và trong pha lỏng.

Mặt khác, đối với hỗn hợp hai cấu tử thì:

$$\begin{aligned} y_B &= 1 - y_A \\ x_B &= 1 - x_A \end{aligned}$$

Suy ra:

$$x_A = \frac{y_A}{\alpha - (\alpha - 1)y_A} \quad (1.10)$$

Phương trình này cho phép tính toán được thành phần của cấu tử ở pha hơi khi xác định được thành phần của cấu tử ở pha lỏng và độ bay hơi tương đối của hai cấu tử  $\alpha$  là đã biết. Để có được một quá trình tách hiệu quả thì độ bay hơi tương đối của hai cấu tử phải không gần với giá trị 1, vì nếu có một cấu tử càng dễ bay hơi hơn cấu tử kia thì độ bay hơi tương đối  $\alpha$  càng khác 1 và thành phần hơi càng dễ giàu cấu tử dễ bay hơi hơn và như vậy thì quá trình tách càng dễ dàng hơn.

Từ định nghĩa về độ bay hơi của một cấu tử, dễ dàng nhận thấy rằng đối với một hệ lý tưởng thì độ bay hơi của một cấu tử tương đương với áp suất hơi của cấu tử tinh khiết. Vì vậy, độ bay hơi tương đối có thể được định nghĩa như sau:

$$\alpha_{12} = \frac{\frac{y_1}{x_1}}{\frac{y_2}{x_2}} = \frac{p_{01}}{p_{02}} \quad (1.11)$$

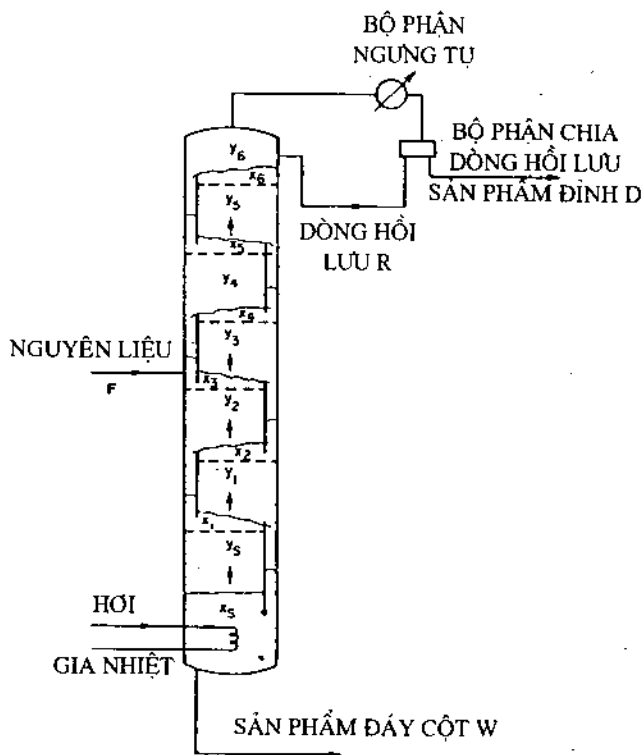
$\alpha$  là một hằng số phụ thuộc vào nhiệt độ đối với mỗi cặp chất.

## 1.2. Phương pháp chưng cất hỗn hợp gồm hai cấu tử

Trong quá trình chưng cất, tồn tại một dòng hơi đi từ dưới lên và một dòng chất lỏng đi từ trên xuống ngược chiều với nhau. Ở phía dưới cột chưng cất khi

được gia nhiệt phần lớn các cấu tử dễ bay hơi hơn và một phần ít hơn các cấu tử khó bay hơi được chuyển thành hơi đi lên. Trong quá trình đi lên các cấu tử ở trạng thái hơi này sẽ bị mất năng lượng. Đến một lúc nào đó một số các cấu tử sẽ bị ngưng tụ thành pha lỏng và đi xuống dưới. Như vậy, pha hơi luôn giàu cấu tử dễ bay hơi hơn pha lỏng, còn pha lỏng còn lại thì ngày càng giàu cấu tử khó bay hơi hơn. Khi quá trình chưng cất kết thúc thì phần chất lỏng còn lại giàu cấu tử khó bay hơi được coi là sản phẩm đáy cột.

### 1.2.1. Quá trình chưng cất phân đoạn



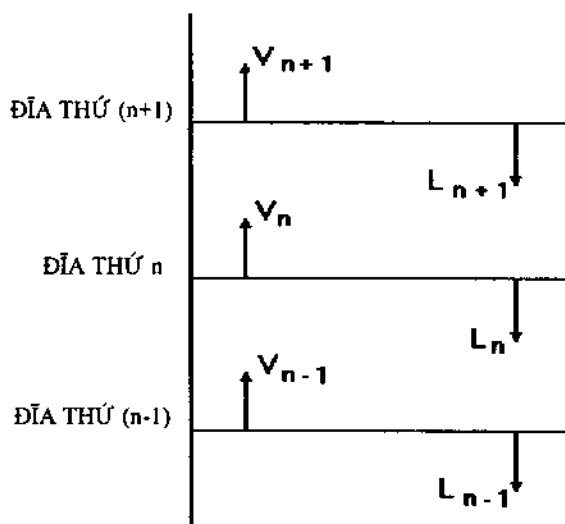
Hình 1.2: Cột chưng cất phân đoạn.

Sơ đồ cột chưng cất phân đoạn được biểu diễn qua hình vẽ 1.2. Cột tách gồm một ống hình trụ được chia thành nhiều phần bởi một dãy các đĩa được đục lỗ cho phép dòng hơi đi lên. Dòng chất lỏng tràn qua thành các đĩa và chảy xuống phía dưới. Dòng hơi ở đỉnh các đĩa được dẫn qua một bộ phận ngưng tụ. Hơi ngưng tụ một phần được hồi lưu trở lại và một phần trở thành sản phẩm đầu cột. Dòng hồi lưu thường được dẫn từ bộ phận ngưng tụ qua một bộ phận hồi lưu và

sau đó được nạp vào cột ở tốc độ được xác định bằng một thiết bị điều khiển phù hợp.

### 1.2.2. Số đĩa lý thuyết cần thiết cho một cột tách

Đĩa lý thuyết là một phần tương đương của cột tách tại đó xảy ra cân bằng trao đổi chất và trao đổi nhiệt giữa dòng hơi đi từ dưới lên và dòng lỏng đi từ trên xuống. Quá trình trao đổi năng lượng đối với một đĩa lý thuyết: mỗi đĩa lý thuyết  $n$  nhận được lượng chất lỏng  $L_{n+1}$  từ đĩa lý thuyết  $n + 1$  và nhận được lượng hơi  $V_{n-1}$  từ đĩa lý thuyết  $n - 1$  ở bên dưới nó. Mặt khác, đĩa lý thuyết  $n$  cũng chuyển lượng chất lỏng  $L_n$  xuống đĩa lý thuyết  $n - 1$  bên dưới nó và lượng hơi  $V_n$  lên đĩa lý thuyết thứ  $n + 1$  bên trên nó (hình 1.3).



**Hình 1.3:** Cân bằng vật chất trong một đĩa lý thuyết của cột tách.

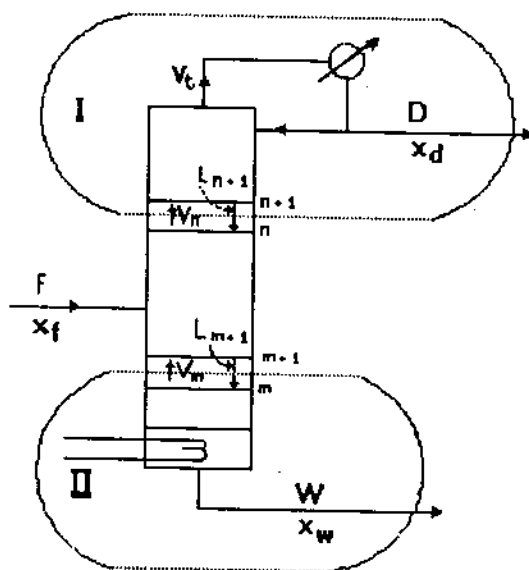
Để thực hiện được một yêu cầu tách đặt ra cần phải thiết kế một cột tách phù hợp và thông số chính của cột tách là số đĩa lý thuyết của cột tách. Phải xem xét nhiệt độ và vật chất vận chuyển qua các đĩa và thiết bị đun sôi lại. Sử dụng các dữ liệu về nhiệt động lực học xem xét lượng chất trao đổi là bao nhiêu để đạt được cân bằng giữa các dòng chất qua mỗi đĩa. Ngoài ra để có tốc độ dòng mong muốn cần phải tính toán đến kích thước cột....

#### **\* Tính số đĩa lý thuyết bằng phương pháp Lewis-Sorel**

Giả sử có một cột chưng cất như hình 1.4, nguyên liệu  $F$  là một hỗn hợp gồm hai cấu tử được chưng cất cho sản phẩm đầu cột  $D$  và sản phẩm cuối cột  $W$



với  $x_d$  và  $x_w$  tương ứng là phân số mol của cấu tử dễ bay hơi hơn ở sản phẩm đầu cột và sản phẩm cuối cột. Hơi đi đến đầu cột được ngưng tụ; một phần lấy ra làm sản phẩm đầu cột, một phần hồi lưu trở lại cột cất.



Hình 1.4: Cân bằng vật chất ở đỉnh và ở đáy cột tách.

Cân bằng vật chất tại đĩa  $n$  như sau:

$$V_n = L_{n+1} + D \quad (1.12)$$

Biểu diễn cân bằng vật chất qua cấu tử dễ bay hơi hơn:

$$y_n V_n = L_{n+1} x_{n+1} + D x_d$$

$$\Rightarrow y_n = \frac{L_{n+1}}{V_n} x_{n+1} + \frac{D}{V_n} x_d$$

Phương trình này cho biết mối quan hệ giữa thành phần hơi ở một đĩa lý thuyết bất kỳ ở trên điểm nạp liệu và thành phần lỏng ở đĩa trên nó. Vì hầu như các dòng chất lỏng là không thay đổi nên có thể thay  $L_{n+1}$  bằng  $L_n$ . Thay vào phương trình trên, nhận được:

$$y_n = \frac{L_n}{V_n} x_{n+1} + \frac{D}{V_n} x_d \quad (1.13)$$

Một cách tương tự, viết phương trình cân bằng vật chất theo cấu tử dễ bay hơi hơn ở đáy cột :

$$L_m = V_m + W$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow y_m V_m &= L_m x_{m+1} - W x_w \\ \Leftrightarrow y_m &= \frac{L_m}{V_m} x_{m+1} - \frac{W}{V_m} x_w \end{aligned} \quad (1.14)$$

Cũng tương tự như phương trình 1.13, phương trình 1.14 cho biết mối quan hệ giữa thành phần hơi của một đĩa lý thuyết ở bên dưới điểm nạp liệu và thành phần lỏng của đĩa bên trên nó. Hai phương trình này chính là các phương trình biểu diễn các đường làm việc.

Như vậy, từ các dữ liệu thành phần cân bằng lỏng - hơi được tìm thấy ở một đĩa xác định dựa vào các phương trình trên có thể tính toán được sự thay đổi về thành phần giữa đĩa lý thuyết này và đĩa lý thuyết khác. Tuy nhiên, cần chú ý rằng đối với các đĩa nằm phía trên điểm nạp liệu thì dùng phương trình 1.13, còn các đĩa nằm phía dưới điểm nạp liệu thì dùng phương trình 1.14.

### Ví dụ 1.1

Một hỗn hợp gồm benzen và toluen chứa 40% mol benzen được dự định tách với sản phẩm đầu cột chứa 90% mol benzen và sản phẩm cuối cột chứa không quá 10% mol benzen. Hỗn hợp này được cung cấp nhiệt và được dẫn vào cột tách tại điểm sôi của nó, hơi đi ra khỏi cột tách được ngưng tụ nhưng không được làm lạnh và được chia làm hai phần: một phần hồi lưu trở lại cột tách còn một phần được lấy ra làm sản phẩm đầu cột của quá trình tách. Người ta dự định vận hành cột tách với tỉ số hồi lưu là 3 kmol/kmol sản phẩm đỉnh.

Hãy xác định số đĩa lý thuyết cần thiết cho yêu cầu tách trên. Biết rằng đường cong cân bằng lỏng-hơi được cho trên hình 1.5.

### Lời giải:

Giả sử có 100 kmol nguyên liệu thì phương trình cân bằng vật chất được viết như sau:

$$100 = D + W$$

Phương trình cân bằng vật chất được viết theo cấu tử dễ bay hơi hơn (benzen):

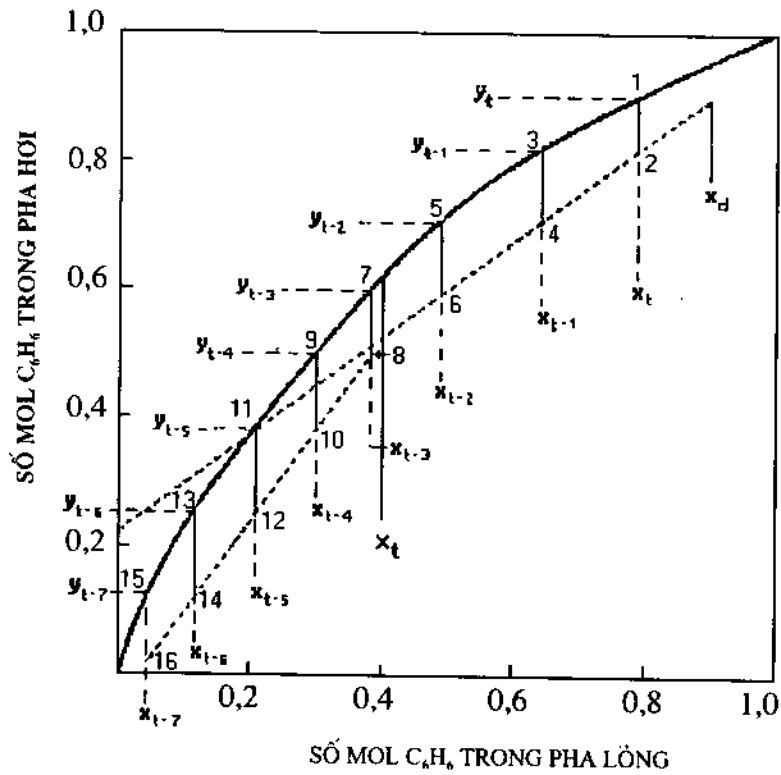
$$100 \times 0,4 = 0,9D + 0,1W$$

Như vậy,

$$40 = 0,9(100 - W) + 0,1W$$

$$\Rightarrow W = 62,5 \text{ kmol}$$

$$D = 37,5 \text{ kmol}$$



Hình 1.5: Tính toán số đĩa lý thuyết theo phương pháp Sorel-Lewis.

Do tỉ lệ hồi lưu là 3 kmol/kmol sản phẩm đỉnh nên:

$$L_n = 3D = 112,5$$

$$\Rightarrow V_n = L_n + D = 112,5 + 37,5 = 150 \text{ kmol}$$

Như vậy, phương trình đường làm việc trên đối với nhiệm vụ cất này sẽ là:

$$y_n = \frac{112,5}{150} x_{n+1} + \frac{37,5}{150} \times 0,9$$

$$\Leftrightarrow y_n = 0,75x_{n+1} + 0,225$$

Vì dòng nguyên liệu được đưa vào ở trạng thái lỏng và tại nhiệt độ sôi của chúng và dòng có sự hồi lưu nên tổng số mol chất lỏng ở tại đĩa lý thuyết dưới điểm nạp nguyên liệu vào sẽ là:

$$\begin{aligned} L_m &= L_n + F \\ &= 112,5 + 100 = 212,5 \text{ kmol} \end{aligned}$$

Mặt khác,

$$\begin{aligned} V_m &= L_m - W \\ &= 212,5 - 62,5 = 150 = V_n \end{aligned}$$

Suy ra:

$$\begin{aligned} y_m &= \frac{212,5}{150} x_{m+1} - \frac{62,5}{150} \times 0,1 \\ \Leftrightarrow y_m &= 1,415 x_{m+1} - 0,042 \end{aligned}$$

Vì toàn bộ hơi ở đỉnh cột được ngưng tụ nên thành phần hơi  $y_1$  ở đầu cột chính là thành phần của sản phẩm đầu cột  $x_d$  và dòng chất lỏng hồi lưu trở lại  $x_r$ . Thành phần chất lỏng ở đầu cột  $x_1$  được tìm từ đường cong cân bằng lỏng-hơi của hệ đang xét khi biết được thành phần hơi tương ứng  $y_1$ . Từ đường cong cân bằng lỏng-hơi của hệ benzen-toluen, ta xác định được  $x_1 = 0,79$ .

Giá trị  $y_{t-1}$  được xác định từ phương trình 1.13 như sau:

$$\begin{aligned} y_{t-1} &= 0,75(0,79) + 0,225 = 0,818 \\ x_{t-1} &= 0,644 \\ y_{t-2} &= 0,75(0,644) + 0,225 = 0,708 \\ x_{t-2} &= 0,492 \\ y_{t-3} &= 0,75(0,492) + 0,225 = 0,594 \\ x_{t-1} &= 0,382 \end{aligned}$$

Giá trị thành phần chất lỏng ở đĩa t-3 gần với thành phần nguyên liệu nên đối với phần tiếp theo chúng ta sẽ sử dụng phương trình đường làm việc dưới (phương trình 1.14) để tính toán.

$$\begin{aligned} y_{t-4} &= 0,145(0,382) - 0,042 = 0,498 \\ x_{t-4} &= 0,298 \\ y_{t-5} &= 0,145(0,298) - 0,042 = 0,379 \\ x_{t-5} &= 0,208 \\ y_{t-6} &= 0,145(0,208) - 0,042 = 0,252 \\ x_{t-6} &= 0,120 \\ y_{t-7} &= 0,145(0,120) - 0,042 = 0,127 \\ x_{t-7} &= 0,048 \end{aligned}$$

Phân số mol của cấu tử nhẹ ở sản phẩm cuối cột nằm trong khoảng giữa đĩa lý thuyết t-6 và đĩa lý thuyết t-7 nên số đĩa lý thuyết cần thiết cho yêu cầu tách trên sẽ là 7 đĩa.

**\* Tính số đĩa lý thuyết theo phương pháp McCabe - Thiele**

Từ các phương trình đường làm việc trên và đường làm việc dưới đã tính được theo phương pháp Sorel-Lewis:

$$y_n = \frac{L_n}{V_n} x_{n+1} + \frac{D}{V_n} x_d \quad (1.15)$$

$$y_m = \frac{L_m}{V_m} x_{m+1} - \frac{W}{V_m} x_w \quad (1.16)$$

Các phương trình 1.15 và 1.16 đã được sử dụng trong phương pháp Sorel-Lewis để tính toán mối tương quan giữa thành phần của các cấu tử ở trạng thái lỏng và trạng thái hơi trên mỗi đĩa lý thuyết. McCabe và Thiele đã chỉ ra rằng, khi các phương trình này được biểu diễn dưới dạng đường thẳng khi nối  $y_n$  với  $x_{n+1}$  và  $y_m$  với  $x_{m+1}$  ta cũng sẽ nhận được một đường giống như đường cong cân bằng lỏng-hơi và cho ta cách tìm số đĩa lý thuyết cần thiết cho yêu cầu tách đó một cách đơn giản bằng đồ thị. Như vậy, đường thẳng được biểu diễn bởi phương trình 1.15 (phương trình đường làm việc trên) sẽ đi qua các điểm 2, 4, 6 trong hình 1.5 và tương tự đường thẳng được biểu diễn bởi phương trình 1.16 (phương trình đường làm việc dưới) sẽ đi qua các điểm 8, 10, 12, 14.

- Đối với đường làm việc trên, từ phương trình 1.15 ta thấy nếu  $\bar{x}_{n+1} = x_d$  thì:

$$y_n = \frac{L_n}{V_n} x_d + \frac{D}{V_n} x_d = x_d \quad (1.17)$$

tức là phương trình này được biểu diễn bằng một đường thẳng đi qua điểm A có toạ độ  $(x_{n+1} = x_d; y_n = x_d)$ .

Mặt khác, nếu  $x_{n+1} = 0$  thì:

$$y_n = \frac{D}{V_n} x_d \quad (1.18)$$

nên phương trình đường làm việc trên còn đi qua điểm B có toạ độ  $x_{n+1} = 0$  và  $y_n$  được chỉ ra như ở phương trình 1.18

- Đối với đường làm việc dưới, từ phương trình 1.16, nếu  $x_{m+1} = x_w$  thì:

$$y_m = \frac{L_m}{V_m} x_w - \frac{W}{V_m} x_w = x_w \quad (1.19)$$

Phương trình 1.19 cho thấy đường làm việc dưới sẽ đi qua điểm C ( $x_w$ ;  $y_w$ ) và có độ dốc  $L_m/V_m$ .

Sau khi vẽ hai đường làm việc, số đĩa lý thuyết cần thiết để đáp ứng được yêu cầu tách đề ra được xác định bằng cách vẽ các đường bậc thang giữa các đường làm việc và đường cong cân bằng bắt đầu từ điểm A.

### Ví dụ 1.2

Giải bài toán đưa ra trong ví dụ 1.1 bằng phương pháp McCabe-Thiele.

### Lời giải

1. Áp dụng định luật cân bằng vật chất đối với lượng nguyên liệu  $F = 100$  kmol, xác định được:

$$V_n = V_m = 150$$

$$L_n = 112,5$$

$$L_m = 212,5$$

$$D = 37,5$$

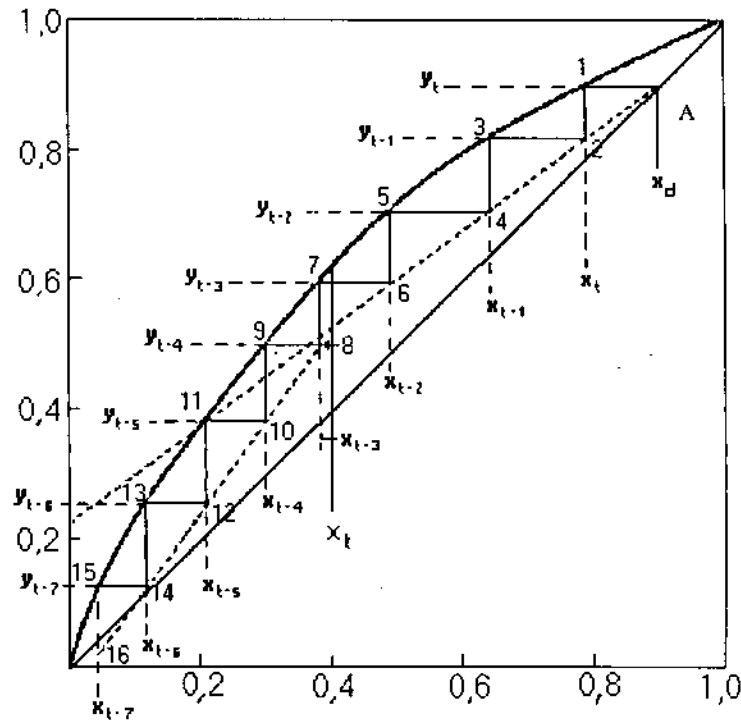
$$W = 62,5$$

2. Áp dụng phương trình 1.15 và phương trình 1.16 viết phương trình đường làm việc trên và phương trình đường làm việc dưới cho bài toán này:

$$y_n = 0,75x_{n+1} + 0,225$$

$$y_m = 1,415x_{m+1} - 0,042$$

3. Từ điểm A, vẽ đường thẳng song song với trục hoành và cắt đường cong cân bằng lỏng-hơi tại điểm 1. Từ điểm số 1, vẽ đường thẳng song song với trục tung và cắt đường làm việc trên tại điểm số 2. Tiếp tục như vậy sẽ nhận được các điểm từ 3 đến 6.
4. Vẽ đường thẳng song song với trục hoành đi qua điểm số 6 và cắt đường cong cân bằng lỏng-hơi tại điểm số 7. Qua điểm số 7 kẻ một đường thẳng song song với trục tung và cắt đường làm việc dưới tại điểm số 8. Tiếp tục sẽ nhận được các điểm từ số 9 đến 16.
5. Đếm số đường bậc thang tạo thành và đó chính là số bậc chưng cất hay số đĩa lý thuyết cần thiết cho quá trình tách.



Hình 1.6: Xác định số đĩa lý thuyết theo phương pháp McCabe-Thiele.

### 1.2.3. Giao điểm của hai đường làm việc

Trong ví dụ 1.1 và ví dụ 1.2 thì nguyên liệu của quá trình chưng cất được đưa vào ở trạng thái lỏng và ở nhiệt độ sôi của hỗn hợp và đó cũng là điểm hai đường làm việc cắt nhau  $X(x_q; y_q)$ . Vị trí giao điểm của hai đường làm việc có ảnh hưởng rất lớn đến số đĩa lý thuyết cần thiết cho một yêu cầu tách, nó phụ thuộc vào nhiệt độ và trạng thái vật lý của nguyên liệu nạp vào cột chưng cất.

Nếu như các đường làm việc cắt nhau ở điểm có tọa độ  $(x_q; y_q)$ , từ các phương trình 1.15 và 1.16 suy ra:

$$V_n y_q = L_n x_q + D x_d \quad (1.19)$$

$$V_m y_q = L_m x_q - W x_w \quad (1.20)$$

Kết hợp hai phương trình này nhận được:

$$y_q (V_m - V_n) = (L_m - L_n) x_q - (D x_d + W x_w) \quad (1.21)$$

Mặt khác, theo định luật cân bằng vật chất cho đĩa nạp liệu:

$$\begin{aligned} F + L_n + V_m &= L_m + V_n \\ \Leftrightarrow V_m - V_n &= L_m - L_n - F \end{aligned} \quad (1.22)$$

Để nhận được mối tương quan giữa  $L_n$  và  $L_m$ , cần phải viết phương trình cân bằng entanpi cho đĩa tại đó nguyên liệu được nạp vào và để biết được điều gì sẽ xảy ra khi nguyên liệu được nạp vào cột. Nếu như tất cả nguyên liệu đều được nạp vào ở thể lỏng và tại nhiệt độ sôi của nó, lượng hơi lưu  $L_m$  xuống đĩa ở phía dưới nó sẽ là  $L_n + F$ . Nếu nguyên liệu ở trạng thái lỏng và nhiệt độ là  $T_f$  thấp hơn nhiệt độ hỗn hợp sôi, thì một phần hơi ở đĩa dưới đó sẽ ngưng tụ lại và cung cấp đủ lượng năng lượng để làm cho nhiệt độ nguyên liệu tăng đến nhiệt độ sôi của nó.

Nếu gọi  $H_f$  là entanpi của một mol nguyên liệu,  $H_{fs}$  là entanpi của một mol nguyên liệu ở nhiệt độ sôi của nó. Như vậy, lượng nhiệt cần thiết để nhiệt độ của nguyên liệu tăng đến nhiệt độ sôi của nó là  $F(H_{fs} - H_f)$  và số mol ở trạng thái hơi được ngưng tụ để cung cấp năng lượng là:

$$\frac{F(H_{fs} - H_f)}{\lambda}$$

với  $\lambda$  là nhiệt chuyển pha của hơi đó.

Suy ra:

$$\begin{aligned} L_m &= L_n + F + \frac{F(H_{fs} - H_f)}{\lambda} \\ L_m &= L_n + F \left( \frac{\lambda + H_{fs} - H_f}{\lambda} \right) \\ L_m &= L_n + qF \end{aligned} \quad (1.23)$$

Trong đó:

$$q = \frac{\text{nhiệt hóa hơi một mol nguyên liệu}}{\text{nhiệt chuyển pha của nguyên liệu}}$$

Từ phương trình 1.22 suy ra:

$$V_m - V_n = F(q - 1) \quad (1.24)$$

Mặt khác, cân bằng vật chất viết cho cả cột tách đối với cấu tử nhẹ là:

$$F x_f = D x_d + W x_w$$

Như vậy, từ phương trình 1.21 suy ra:

$$F(q - 1)y_q = qFx_q - Fx_f$$

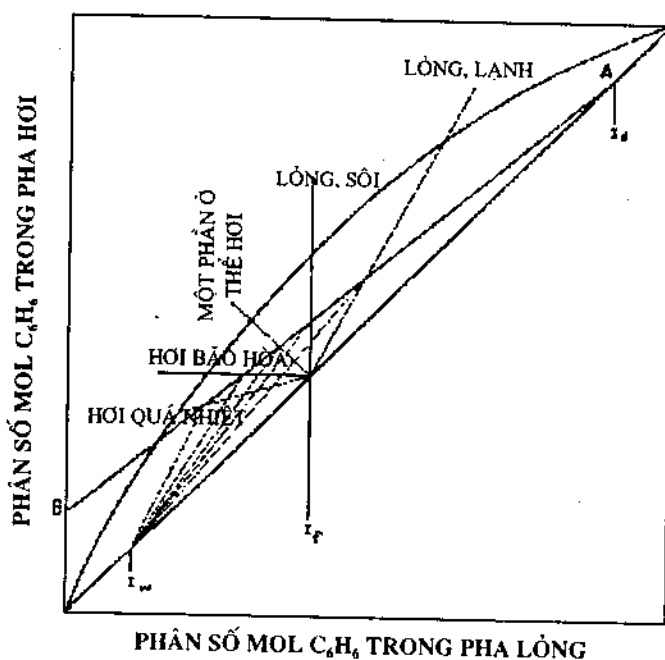


$$y_q = \frac{q}{q-1} x_q - \frac{x_f}{q-1} \quad (1.25)$$

Phương trình 1.25 được gọi là phương trình đường  $q$ . Nếu  $x_q = x_f$  và  $y_q = y_f$  thì giao điểm của hai đường làm việc nằm trên đường thẳng có độ dốc  $q/(q-1)$  và đi qua điểm  $(x_f, y_f)$ . Khi  $y_q = 0$ ,  $x_q = x_f/q$ , đường  $q$  được vẽ qua hai điểm được xác định một cách dễ dàng. Phương trình tính giá trị  $q$  cho phép ta tính được độ dốc của đường  $q$ .

- Nguyên liệu lạnh ở trạng thái lỏng  $q > 1$
- Nguyên liệu được nạp vào ở nhiệt độ sôi của nó  $q = 1$
- Nguyên liệu ở thể hơi một phần  $0 < q < 1$
- Nguyên liệu ở trạng thái hơi bão hoà  $q = 0$
- Nguyên liệu ở trạng thái hơi quá nhiệt  $q < 0$

Các sự thay đổi về trạng thái nguyên liệu dẫn đến sự thay đổi độ dốc của đường  $q$  được biểu diễn qua hình 1.7



**Hình 1.7:** Ảnh hưởng của trạng thái nguyên liệu đối với giao điểm của các đường làm việc tại một tỉ số hồi lưu xác định.

Sự thay đổi độ dốc của đường  $q$  sẽ làm thay đổi thành phần của hỗn hợp lỏng, tức là làm thay đổi giao điểm của hai đường làm việc. Điều này có nghĩa là nó sẽ làm thay đổi số đĩa lý thuyết cần thiết để đáp ứng được một yêu cầu tách đề ra.

#### 1.2.4. Tầm quan trọng của tỉ số hồi lưu

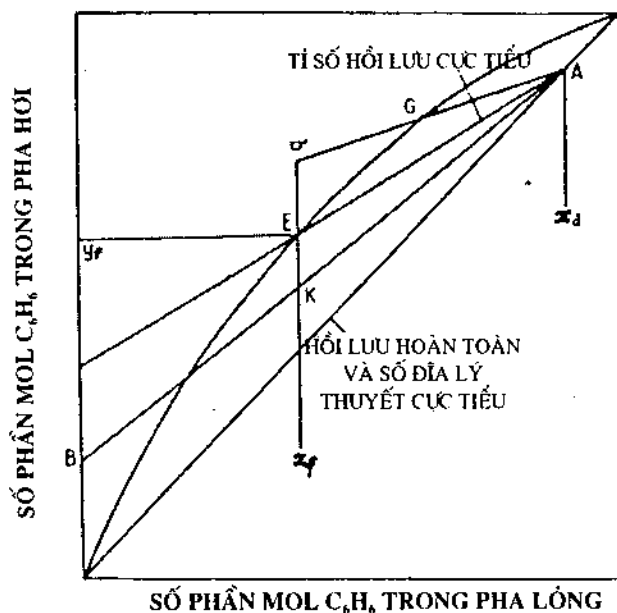
Tỉ số hồi lưu  $R$  được định nghĩa như sau:

$$R = \frac{L_n}{D} \quad (1.26)$$

Như vậy, phương trình đường làm việc trên (1.15) có thể được biểu diễn theo một cách khác như sau:

$$y_n = \frac{R}{R+1} x_{n+1} + \frac{x_d}{R+1} \quad (1.27)$$

Bất kỳ một sự thay đổi nào của tỉ số hồi lưu cũng dẫn đến sự thay đổi độ dốc của đường làm việc và dẫn đến sự thay đổi số đĩa lý thuyết cần thiết cho một yêu cầu tách đặt ra. Nếu như  $R$  đã biết, đường làm việc trên được vẽ một cách dễ dàng qua hai điểm: điểm A ( $x_d; x_d$ ) và điểm B ( $0; x_d/(R+1)$ ) (hình 1.6). Phương pháp này tránh được việc phải tính toán các giá trị  $L_n$ ,  $V_n$  thực khi mà yêu cầu đặt ra chỉ là tính toán số đĩa lý thuyết cho yêu cầu tách.



**Hình 1.8:** Ảnh hưởng của tỉ số hồi lưu đến số đĩa lý thuyết cần thiết cho một yêu cầu tách.

Nếu sản phẩm đầu cột không được lấy ra khỏi cột tách ( $D = 0$ ), tức là cột được vận hành dưới điều kiện dòng hồi lưu là hoàn toàn, từ phương trình 1.24, đường làm việc trên có giá trị độ dốc lớn nhất, trùng với đường  $y = x$ . Khi tỉ số hồi lưu giảm, độ dốc của đường làm việc trên cũng giảm và cần nhiều hơn các bậc tách để thành phần của cấu tử nhẹ trong hỗn hợp tăng từ  $x_f$  đến  $x_d$ , biểu diễn bằng đoạn AK trong hình vẽ 1.8.

Khi tỉ số hồi lưu  $R$  tiếp tục giảm đến một giá trị nào đó đường làm việc trên là đường AE, lúc này cần một số bậc tách vô hạn để nồng độ cấu tử nhẹ tăng từ  $x_f$  đến  $x_d$ . Trong điều kiện này các bậc tách ở vùng nồng độ gần  $x_f$  là rất gần nhau và thành phần của cấu tử nhẹ hơn ở đĩa bên trên đó hầu như không tăng. Điều kiện vận hành cột như vậy được coi như vận hành với tỉ số hồi lưu cực tiểu  $R_m$ . Bất kể sự tăng tỉ số hồi lưu nào ( $R > R_m$ ), dù rất nhỏ cột chưng cất cũng có thể thực hiện được yêu cầu tách tuy nhiên số đĩa lý thuyết cần có của cột là rất lớn. Bất kể một đường làm việc AG nào mà có tỉ số hồi lưu  $R$  nhỏ hơn  $R_m$  thì cũng không thể làm cho nồng độ của hỗn hợp đi từ  $x_f$  qua được điểm G. Từ đây ta có thể rút ra hai điểm, đó là:

- Thứ nhất, số đĩa lý thuyết cực tiểu cần để đáp ứng được một yêu cầu tách đề ra.
- Thứ hai, khi cột tách được vận hành ở tỉ số hồi lưu nhỏ hơn tỉ số hồi lưu cực tiểu thì không thể làm giàu cấu tử nhẹ hơn dù số bậc tách là bao nhiêu đi nữa.

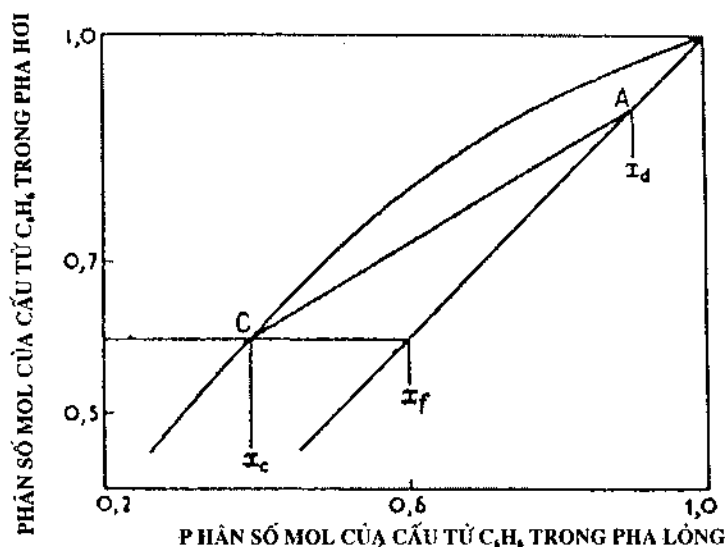
### 1.2.5. Tính tỉ số hồi lưu cực tiểu $R_m$

Hình 1.8 biểu diễn các điều kiện khi đường  $q$  thẳng đứng và điểm E ( $x_f$ ;  $y_f$ ) nằm trên đường cong cân bằng lỏng-hơi. Khi đó, độ dốc của đường AE được xác định:

$$\begin{aligned} \frac{R_m}{R_m + 1} &= \frac{x_d - y_f}{x_d - x_f} \\ \Rightarrow R_m &= \frac{x_d - y_f}{y_f - x_f} \end{aligned} \quad (1.28)$$

Nếu đường  $q$  nằm ngang như trong hình 1.9, đường làm việc trên được biểu diễn qua đường AC, với tọa độ điểm C ( $x_c$ ;  $y_c$ ). Khi đó:

$$R_m = \frac{x_d - y_c}{y_c - x_c} = \frac{x_d - x_f}{x_f - x_c} \quad (1.29)$$



**Hình 1.9:** Tỷ số hồi lưu cực tiểu và nguyên liệu được đưa vào ở trạng thái hơi bão hòa.

### 1.2.6. Phương trình Underwood-Fenske

Đối với các hỗn hợp lý tưởng, độ bay hơi tương đối của các cặp cấu tử trong hệ có thể xem như hằng số, giá trị  $R_m$  có thể được tính từ các thông số vật lý của hệ. Như vậy, nếu  $x_{nA}$  và  $x_{nB}$  là phân số mol của các cấu tử A và B trong pha lỏng ở đĩa  $n$  thì cân bằng vật chất ở đĩa  $n$  được viết như sau:

$$V_n y_{nA} = L_n x_{(n+1)A} + D x_{dA} \quad (1.30)$$

$$V_n y_{nB} = L_n x_{(n+1)B} + D x_{dB} \quad (1.31)$$

Dưới điều kiện vận hành ở tỷ số hồi lưu cực tiểu, một cột cất phải có vô hạn số đĩa lý thuyết. Điều này có nghĩa thành phần của các cấu tử ở đĩa thứ  $n$  tương tự thành phần của các cấu tử ở đĩa thứ  $n + 1$ . Chia phương trình 1.30 cho phương trình 1.31 và thay  $x_{(n+1)A} = x_{nA}$  và  $x_{(n+1)B} = x_{nB}$  nhận được:

$$\alpha \frac{x_{nA}}{x_{nB}} = \frac{y_{nA}}{y_{nB}} = \frac{L_n x_{nA} + D x_{dA}}{L_n x_{nB} + D x_{dB}}$$

$$\Rightarrow \left( \frac{L_n}{D} \right)_m = R_m = \frac{1}{\alpha - 1} \left( \frac{x_{dA}}{x_{nA}} - \alpha \frac{x_{dB}}{x_{nB}} \right) \quad (1.32)$$

Trong biểu thức đại số này  $\alpha$  là độ bay hơi tương đối giữa hai cấu tử A và B. Vì vậy, nhìn chung mỗi đĩa có một giá trị  $R_m$  khác nhau. Để đáp ứng được yêu cầu tách, giá trị  $R_m$  cực tiểu thích hợp là giá trị  $R_m$  của đĩa mà tại đó nguyên liệu được nạp vào, như vậy tỉ số hồi lưu cực tiểu đối với yêu cầu tách là:

$$R_m = \frac{1}{\alpha - 1} \left[ \frac{x_{dA}}{x_{fA}} - \alpha \frac{x_{dB}}{x_{fB}} \right] \quad (1.33)$$

Đối với hỗn hợp gồm hai cấu tử:

$$R_m = \frac{1}{\alpha - 1} \left[ \frac{x_{dA}}{x_{fA}} - \alpha \frac{(1 - x_{dA})}{(1 - x_{fA})} \right] \quad (1.34)$$

### 1.2.7. Tính số đĩa lý thuyết khi dòng hồi lưu hoàn toàn - Phương trình Fenske

Độ bay hơi tương đối  $\alpha$  còn được gọi là hệ số tách của một quá trình chưng cất. Biểu thức liên hệ giữa thành phần lỏng và hơi với hệ số tách ở đáy cột:

$$\frac{y_w}{1 - y_w} = \alpha \frac{x_w}{1 - x_w} \quad (1.35)$$

Nếu thành phần hơi của dung dịch lọc  $x_{fS}$  là  $y_{fS}$  được ngưng tụ hoàn toàn ở đĩa thứ nhất ta có:  $x_1 = y_w$ .

Với thành phần lỏng ở đĩa thứ nhất ta lại có thành phần hơi tương ứng là  $y_1$ . Như vậy tại đĩa thứ nhất ta có:

$$\frac{y_1}{1 - y_1} = \alpha \frac{x_1}{1 - x_1}$$

Kết hợp hai phương trình trên nhận được:

$$\frac{y_1}{1 - y_1} = \alpha^2 \frac{x_w}{1 - x_w}$$

Một cách tương tự suy ra:

$$\frac{y_n}{1 - y_n} = \alpha^{n+1} \frac{x_w}{1 - x_w}$$

Tại đĩa cuối cùng ta nhận được sản phẩm đỉnh cột nên  $y_n = x_d$ :

$$\frac{x_d}{1-x_d} = \alpha^{n+1} \frac{x_w}{1-x_w}$$

Vì phương trình 1.35 được suy ra theo lý thuyết về cân bằng giữa pha lỏng và pha hơi, tức là coi quá trình làm việc của cột chưng cất là dựa theo đường cong cân bằng lỏng-hơi. Vì vậy, số bậc chưng cất  $n$  trên thực chất là số bậc chưng cất khi dòng hồi lưu hoàn toàn.

Từ phương trình 1.35, qua một số phép biến đổi toán học nhận được phương trình Fenske để tính số đĩa lý thuyết cực tiểu:

$$n_{\min} + 1 = \frac{\lg \left[ \frac{x_d}{1-x_d} \frac{1-x_w}{x_w} \right]}{\lg \alpha} \quad (1.36)$$

### Ví dụ 1.3

Đối với yêu cầu tách hỗn hợp benzen và toluen như đã đưa ra trong ví dụ 1.1,  $x_d = 0,9$ ;  $x_w = 0,1$ ;  $x_f = 0,4$ , sử dụng giá trị độ bay hơi tương đối trung bình của benzen và toluen là 2,4 thì tính được số đĩa lý thuyết cần thiết để đáp ứng nhu cầu tách trên khi dòng hồi lưu hoàn toàn là:

$$n+1 = \frac{\log \left[ \left( \frac{0,9}{1-0,1} \right) \left( \frac{1-0,1}{0,1} \right) \right]}{\log 2,4} = 5,0$$

Như vậy số đĩa lý thuyết của cột tách này là 4 và nó không phụ thuộc vào thành phần của nguyên liệu nạp vào cột.

Nếu nguyên liệu được nạp vào cột ở trạng thái lỏng và ở nhiệt độ sôi của nó thì tỉ số hồi lưu cực tiểu được tính như sau:

$$\begin{aligned} R_m &= \frac{1}{\alpha - 1} \left[ \frac{x_d}{x_f} - \alpha \frac{(1-x_d)}{(1-x_f)} \right] \\ &= \frac{1}{2,4 - 1} \left[ \frac{0,9}{0,4} - 2,4 \times \frac{0,1}{0,6} \right] \\ &= 1,32 \end{aligned}$$

Sử dụng phương pháp đồ thị (hình 1.8), khi  $y_f = 0,61$  thì giá trị  $R_m$  nhận được sẽ là:

$$R_m = \frac{x_d - y_f}{y_f - x_f} = \frac{0,9 - 0,61}{0,61 - 0,4} = 1,38$$

### 1.3. Hỗn hợp nhiều cấu tử

#### 1.3.1. Cân bằng lỏng-hơi

Đối với hỗn hợp gồm hai cấu tử, tại áp suất không đổi, hàm số biểu diễn sự phụ thuộc của thành phần pha hơi vào thành phần pha lỏng là một hàm đơn trị. Phương pháp McCabe-Thiele dựa trên đường cong cân bằng lỏng-hơi để xác định số đĩa lý thuyết cần thiết để đáp ứng một yêu cầu tách đề ra. Với một hỗn hợp gồm ba cấu tử thì cân bằng lỏng-hơi phức tạp hơn. Tại một áp suất cố định, để xác định được thành phần của một cấu tử trong pha hơi thì cần phải biết thành phần của tất cả các cấu tử khác trong pha lỏng. Ví dụ, số phần mol của cấu tử A trong pha hơi  $y_A$  không chỉ phụ thuộc vào thành phần của nó trong pha lỏng  $x_A$  mà còn phụ thuộc vào tỉ lệ tương đối của hai cấu tử còn lại.

#### 1.3.2. Thành phần của nguyên liệu và của sản phẩm

Đối với hỗn hợp gồm hai cấu tử, nếu như nguyên liệu có thành phần  $x_1$  và sản phẩm đầu cột có thành phần  $x_n$  được biết đối với một cấu tử thì thành phần của sản phẩm ở đáy cột có thể có bất kỳ giá trị nào mong muốn và từ các phương trình cân bằng vật chất sẽ xác định được lượng sản phẩm đầu cột D và sản phẩm cuối cột W. Việc tự do lựa chọn thành phần sẽ không được áp dụng cho hệ có nhiều hơn ba cấu tử. Gilliland và Reed đã xác định số bậc tự do cho quá trình chưng cất các hỗn hợp nhiều cấu tử. Trong trường hợp chung, khi thành phần nguyên liệu, đặc điểm của nguyên liệu và áp suất vận hành đã được biết, chỉ còn có bốn biến số có thể được lựa chọn. Nếu như tỉ số hồi lưu R là xác định và số đĩa lý thuyết bên trên và bên dưới đĩa nạp liệu được chọn thì chỉ còn có hai biến số, và như vậy thành phần của sản phẩm ở đầu cột và cuối cột sẽ bị cố định. Điều này có nghĩa là không thể tránh được việc tính toán số đĩa lý thuyết bằng phương pháp thử. Một phép toán hoàn toàn chính xác cho bài toán loại này là không có được, vì số liệu cân bằng và độ hiệu dụng của đĩa lý thuyết không phải là các giá trị hoàn toàn đúng. Bài toán này thường được đơn giản hóa khi giả thiết rằng tất cả các cấu tử dễ bay hơi hơn có mặt ở đầu cột và tất cả các cấu tử khó bay hơi hơn có mặt ở đáy cột.

### 1.3.3. Cấu tử nhẹ và cấu tử nặng chủ đạo

**Bảng 1.1:** Tách hỗn hợp nhiều cấu tử

| Nguyên liệu | Sản phẩm đầu cột | Sản phẩm đáy cột |
|-------------|------------------|------------------|
| A           | A                |                  |
| B           | B                | B                |
| C           | C                | C                |
| D           |                  | D                |

Khi tách các hỗn hợp nhiều cấu tử thường có yêu cầu là tách hai cấu tử ra khỏi nhau. Những cấu tử này được gọi là những cấu tử chính và việc chỉ tập trung vào các cấu tử này có thể làm đơn giản hóa các hỗn hợp phức tạp. Giả sử rằng có một hỗn hợp gồm 4 cấu tử A, B, C, D, trong đó A là cấu tử dễ bay hơi nhất và D là cấu tử kém bay hơi nhất cần được tách như trong bảng 1.1.

Như vậy, B là cấu tử nhẹ nhất có mặt trong sản phẩm đáy cột và được gọi là cấu tử nhẹ chủ đạo, còn C là cấu tử nặng nhất có mặt trong sản phẩm đầu cột và được gọi là cấu tử nặng chủ đạo. Mục đích chính của quá trình phân đoạn là tách B ra khỏi C.

### 1.3.4. Tính toán số đĩa lý thuyết cần thiết cho một yêu cầu tách

Một trong các phương pháp thành công nhất trong việc tính toán số đĩa lý thuyết cần thiết cho một yêu cầu tách đề ra là phương pháp của Lewis và Matheson. Phương pháp này dựa trên phương pháp Sorel-Lewis đã được trình bày trong phần tách các hỗn hợp gồm hai cấu tử. Nếu như đã biết thành phần của pha lỏng ở một đĩa nào đó thì thành phần của nó ở pha hơi sẽ được tính toán dựa vào áp suất hơi và độ bay hơi tương đối của từng cấu tử. Thành phần pha lỏng ở đĩa bên trên nó sẽ được xác định từ phương trình đường làm việc, như hỗn hợp hai cấu tử, nhưng trong trường hợp này sẽ có các phương trình riêng cho mỗi cấu tử.



Giả sử một hỗn hợp có chứa các cấu tử A, B, C, D, ..., có phân số mol tương ứng là  $x_A, x_B, x_C, x_D, \dots$  ở pha lỏng và  $y_A, y_B, y_C, y_D, \dots$  ở pha hơi. Khi đó:

$$y_A + y_B + y_C + y_D + \dots = 1 \quad (1.37)$$

$$\Rightarrow \frac{y_A}{y_B} + \frac{y_B}{y_B} + \frac{y_C}{y_B} + \frac{y_D}{y_B} + \dots = \frac{1}{y_B}$$

$$\Rightarrow \alpha_{AB} \frac{x_A}{x_B} + \alpha_{BB} \frac{x_B}{x_B} + \alpha_{CB} \frac{x_C}{x_B} + \alpha_{DB} \frac{x_D}{x_B} + \dots = \frac{1}{y_B}$$

$$\Rightarrow \sum (\alpha_{iB} x_i) = \frac{x_B}{y_B}$$

$$\Rightarrow y_B = \frac{x_B}{\sum (\alpha_{iB} x_i)} \quad (1.38)$$

Một cách tương tự,

$$y_A = \frac{x_A}{\sum (\alpha_{iA} x_i)} \quad (1.39)$$

$$y_C = \frac{x_C}{\sum (\alpha_{iC} x_i)} \quad (1.40)$$

$$y_D = \frac{x_D}{\sum (\alpha_{iD} x_i)} \quad (1.41)$$

Như vậy thành phần của pha hơi được xác định từ thành phần của các cấu tử trong pha lỏng và độ bay hơi tương đối của chúng.

#### Ví dụ 1.4

Một hỗn hợp gồm ortho, meta, para mononitrophenol có thành phần của ba đồng phân đó tương ứng là 60; 4 và 36% mol được chưng cất liên tục để cho sản phẩm đầu cột chứa 98% mol ortho và sản phẩm đáy cột chứa 12,5% mol ortho. Hỗn hợp này được chưng cất ở nhiệt độ 410°K và cần một áp suất khoảng 60 kN/m<sup>2</sup>. Nếu cột được vận hành với tỉ số hồi lưu bằng 5 thì cần bao nhiêu đĩa lý thuyết để đáp ứng được yêu cầu tách trên.

#### Lời giải

Độ bay hơi tương đối của ortho đối với para là vào khoảng 1,7 và của ortho đối với meta là 1,16 ở khoảng nhiệt độ 380 và 415K.

Phương trình cân bằng vật chất :

$$100 = D + W$$

$$60 = Dx_{D0} + Wx_{W0}$$

$$\Rightarrow 60 = D \times 0,98 + (100 - D) \times 0,125$$

$$\Rightarrow D = 55,56$$

$$W = 44,44$$

Giả sử sản phẩm đầu cột chứa 0,6% mol meta và 1,4% mol para, từ các số liệu đã cho và các con số tính được ở trên ta lập được bảng sau:

| Các cấu tử | Nguyên liệu |      | Sản phẩm đầu cột |      | Sản phẩm đáy cột |      |
|------------|-------------|------|------------------|------|------------------|------|
|            | kmol        | %mol | kmol             | %mol | kmol             | %mol |
| Ortho (o)  | 60          | 60   | 54,44            | 98   | 5,56             | 12,5 |
| Meta (m)   | 4           | 4    | 0,33             | 0,6  | 3,67             | 8,3  |
| Para (p)   | 36          | 36   | 0,79             | 1,4  | 35,21            | 79,2 |
|            | 100         | 100  | 55,56            | 100  | 44,44            | 100  |

#### Phương trình các đường làm việc

Các dòng chất lỏng và dòng hơi trong cột có thể nhận được như sau:

- Bên trên điểm nạp liệu:

$$\text{Dòng chất lỏng đi xuống } L_n = 5D = 277,8$$

$$\text{Dòng hơi đi lên } V_n = 6D = 333,4$$

- Bên dưới điểm nạp liệu:

$$\text{Dòng chất lỏng đi xuống } L_m = L_n + F = 277,8 + 100 = 377,8$$

$$\text{Dòng hơi đi lên } V_m = L_m - W = 377,8 - 44,44 = 333,4$$

Các phương trình đường làm việc dưới:

$$y_m = \frac{L_m}{V_m} x_{m+1} - \frac{W}{V_m} x_w \quad (\text{từ pt 1.16})$$

Đối với ortho :

$$\begin{aligned}
 y_{mo} &= \frac{377,8}{333,4} x_{m+1} - \frac{44,44}{333,4} x'_w \\
 &= 1,133x_{m+1} - 0,0166
 \end{aligned}
 \tag{1.42}$$

Đối với meta :

$$y_{mn} = 1,133x_{m+1} - 0,011$$

Đối với para :

$$y_{mp} = 1,133x_{m+1} - 0,105$$

Các phương trình đường làm việc trên:

$$y_n = \frac{L_n}{V_n} x_{n+1} + \frac{D}{V_n} x_d \quad (\text{từ pt 1.15})$$

Đối với ortho :

$$\begin{aligned}
 y_{no} &= \frac{277,8}{333,4} x_{n+1} - \frac{55,56}{333,4} x_d \\
 &= 0,833x_{n+1} + 0,0163
 \end{aligned}
 \tag{1.43}$$

Đối với meta :

$$y_{nm} = 0,833x_{n+1} - 0,001$$

Đối với para :

$$y_{np} = 0,33x_{m+1} + 0,002$$

### Thành phần của pha lỏng trong bậc chưng cất đầu tiên

Nhiệt độ của quá trình chưng cất được giữ ở 410K, áp suất của cột khoảng 60 kN/m<sup>2</sup>. Thành phần hơi của cột cất được tính theo phương trình:

$$y_{s0} = \frac{\alpha_0 x_{s0}}{\sum \alpha x_s}$$

Thành phần lỏng của đĩa đầu tiên được tính theo phương trình 1.42, như vậy đối với ortho:

$$0,191 = 1,133x_1 - 0,0166$$

$$\Rightarrow x_1 = 0,183$$

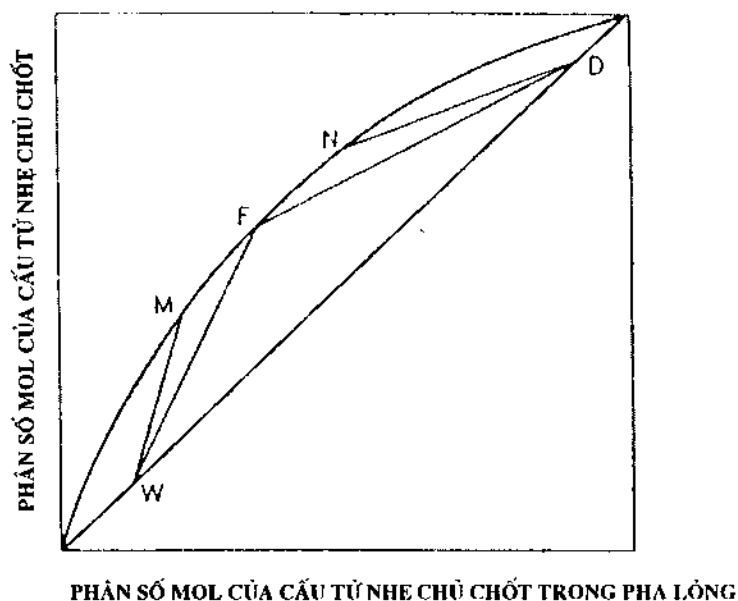
Thành phần cấu tử ở các đĩa xác định được theo phương pháp này được cho trong bảng dưới đây. Thành phần của các cấu tử ở trong pha lỏng ở đĩa thứ 7 có tỉ lệ thành phần của ortho và para tương tự như trong nguyên liệu và như vậy nguyên liệu sẽ được dẫn vào đường này. Các đĩa ở bên trên đĩa nạp nguyên liệu cũng được tính toán một cách tương tự và sử dụng phương trình các đường làm việc (p.t 1.43). Dòng hơi bay lên từ đĩa thứ 16 có thành phần ortho tương tự như thành phần yêu cầu đối với sản phẩm đầu cột. Vậy, cần có 16 đĩa lý thuyết để đáp ứng yêu cầu tách để ra.

| Thành phần các cấu tử ở đĩa phía dưới đĩa nạp liệu |              |              |              |              |              |              |              |
|----------------------------------------------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| cấu tử                                             | $x_a$        | $\alpha x_a$ | $y_a$        | $x_1$        | $\alpha x_1$ | $y_1$        | $x_2$        |
| <i>o</i>                                           | 0,125        | 0,211        | 0,191        | 0,183        | 0,308        | 0,270        | 0,253        |
| <i>m</i>                                           | 0,083        | 0,096        | 0,088        | 0,088        | 0,102        | 0,090        | 0,089        |
| <i>p</i>                                           | 0,792        | 0,792        | 0,721        | 0,729        | 0,729        | 0,640        | 0,658        |
|                                                    | 1            | 1,099        | 1            | 1            | 1,139        | 1            | 1            |
| cấu tử                                             | $\alpha x_2$ | $y_2$        | $x_3$        | $\alpha x_3$ | $y_3$        | $x_4$        | $\alpha x_4$ |
| <i>o</i>                                           | 0,430        | 0,357        | 0,330        | 0,561        | 0,450        | 0,411        | 0,698        |
| <i>m</i>                                           | 0,103        | 0,086        | 0,086        | 0,100        | 0,080        | 0,080        | 0,093        |
| <i>p</i>                                           | 0,658        | 0,557        | 0,584        | 0,584        | 0,470        | 0,509        | 0,509        |
|                                                    | 1,191        | 1            | 1            | 1,245        | 1            | 1            | 1,300        |
| cấu tử                                             | $y_4$        | $x_5$        | $\alpha x_5$ | $y_5$        | $x_6$        | $\alpha x_6$ | $y_6$        |
| <i>o</i>                                           | 0,537        | 0,488        | 0,830        | 0,613        | 0,556        | 0,944        | 0,674        |
| <i>m</i>                                           | 0,071        | 0,072        | 0,083        | 0,061        | 0,063        | 0,073        | 0,052        |
| <i>p</i>                                           | 0,392        | 0,440        | 0,440        | 0,326        | 0,381        | 0,381        | 0,274        |
|                                                    | 1            | 1            | 1,353        | 1            | 1            | 1,398        | 1            |
| cấu tử                                             | $x_7$        |              |              |              |              |              |              |
| <i>o</i>                                           | 0,609        |              |              |              |              |              |              |
| <i>m</i>                                           | 0,055        |              |              |              |              |              |              |
| <i>p</i>                                           | 0,336        |              |              |              |              |              |              |
|                                                    | 1            |              |              |              |              |              |              |

Thành phần các cấu tử ở đĩa phía trên đĩa nạp liệu

| cấu tử   | $x_7$           | $\alpha x_7$    | $y_7$           | $x_8$           | $\alpha x_8$    | $y_8$           | $x_9$           |
|----------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| <i>o</i> | 0,609           | 1,035           | 0,721           | 0,669           | 1,136           | 0,770           | 0,728           |
| <i>m</i> | 0,055           | 0,064           | 0,044           | 0,051           | 0,059           | 0,040           | 0,047           |
| <i>p</i> | 0,336           | 0,336           | 0,235           | 0,280           | 0,280           | 0,190           | 0,225           |
|          | 1               | 1,435           | 1               | 1               | 1,475           | 1               | 1               |
| cấu tử   | $\alpha x_9$    | $y_9$           | $x_{10}$        | $\alpha x_{10}$ | $y_{10}$        | $x_{11}$        | $\alpha x_{11}$ |
| <i>o</i> | 1,238           | 0,816           | 0,782           | 1,330           | 0,856           | 0,823           | 1,415           |
| <i>m</i> | 0,054           | 0,035           | 0,041           | 0,047           | 0,030           | 0,035           | 0,040           |
| <i>p</i> | 0,225           | 0,149           | 0,177           | 0,177           | 0,144           | 0,133           | 0,133           |
|          | 1,517           | 1               | 1               | 1,554           | 1               | 1               | 1,588           |
| cấu tử   | $y_{11}$        | $x_{12}$        | $\alpha x_{12}$ | $y_{12}$        | $x_{13}$        | $\alpha x_{13}$ | $y_{13}$        |
| <i>o</i> | 0,891           | 0,874           | 1,485           | 0,920           | 0,907           | 1,542           | 0,940           |
| <i>m</i> | 0,025           | 0,029           | 0,033           | 0,020           | 0,023           | 0,027           | 0,017           |
| <i>p</i> | 0,084           | 0,097           | 0,097           | 0,060           | 0,070           | 0,070           | 0,043           |
|          | 1               | 1               | 1,615           | 1               | 1               | 1,693           | 1               |
| cấu tử   | $x_{14}$        | $\alpha x_{14}$ | $y_{14}$        | $x_{15}$        | $\alpha x_{15}$ | $y_{15}$        | $x_{16}$        |
| <i>o</i> | 0,932           | 1,585           | 0,957           | 0,953           | 1,620           | 0,970           | 0,968           |
| <i>m</i> | 0,019           | 0,022           | 0,013           | 0,014           | 0,016           | 0,010           | 0,010           |
| <i>p</i> | 0,049           | 0,049           | 0,030           | 0,033           | 0,033           | 0,020           | 0,022           |
|          | 1               | 1,656           | 1               | 1               | 1,669           | 1               | 1               |
| cấu tử   | $\alpha x_{16}$ | $y_{16}$        |                 |                 |                 |                 |                 |
| <i>o</i> | 1,632           | 0,980           |                 |                 |                 |                 |                 |
| <i>m</i> | 0,012           | 0,007           |                 |                 |                 |                 |                 |
| <i>p</i> | 0,022           | 0,013           |                 |                 |                 |                 |                 |
|          | 1,666           | 1               |                 |                 |                 |                 |                 |

### 1.3.5. Tỉ số hồi lưu cực tiểu



**Hình 1.10:** Giản đồ McCabe-Thiele đối với hai cấu tử chủ chốt.

Đối với quá trình chưng cất hỗn hợp gồm hai cấu tử, tỉ số hồi lưu cực tiểu được xác định bởi đường làm việc với các điểm nối là thành phần sản phẩm và giao điểm của đường  $q$  với đường cong cân bằng lỏng-hơi. Như vậy, nếu như trên hình 1.10 biểu diễn giản đồ McCabe-Thiele cho hỗn hợp hai cấu tử của hai hợp phần chủ đạo trong một hỗn hợp đa cấu tử thì DF và WF chính là các tỉ số hồi lưu cực tiểu tương ứng của các phần tinh chế và sục hơi. Dọc theo các đường làm việc này, sự thay đổi về thành phần theo các đĩa nhỏ dần cho đến khi không đáng kể tại đĩa nạp liệu. Tại điểm F, thành phần của hỗn hợp được gọi là "điểm bị kẹp".

### 1.3.6. Xác định tỉ số hồi lưu cực tiểu theo phương pháp Underwood

Trong trường hợp độ bay hơi tương đối của các cấu tử được coi là không đổi, Underwood đã đưa ra hai phương trình để tính giá trị tỉ số hồi lưu cực tiểu như sau:

$$\frac{\alpha_A x_{IA}}{\alpha_A - \theta} + \frac{\alpha_B x_{IB}}{\alpha_B - \theta} + \frac{\alpha_C x_{IC}}{\alpha_C - \theta} + \dots = 1 - q \quad (1.44)$$

$$\frac{\alpha_A x_{dA}}{\alpha_A - \theta} + \frac{\alpha_B x_{dB}}{\alpha_B - \theta} + \frac{\alpha_C x_{dC}}{\alpha_C - \theta} + \dots = 1 - q \quad (1.45)$$

trong đó:

$x_{fA}$ ,  $x_{fB}$ ,  $x_{fC}$ ,  $x_{dA}$ ,  $x_{dB}$ ,  $x_{dC}$ , ... là phân số mol của các cấu tử A, B, C trong nguyên liệu và trong phần dịch cất với A là cấu tử nhẹ chủ đạo, B là cấu tử nặng chủ đạo;

$q$  là tỉ số giữa lượng nhiệt cần thiết để bay hơi 1 mol nguyên liệu và nhiệt chuyển pha nguyên liệu;

$\alpha_A$ ,  $\alpha_B$ ,  $\alpha_C$ , ... là độ bay hơi tương đối tương ứng của các cấu tử với một cấu tử kém bay hơi nhất;

$\theta$  là một hệ số được tính từ phương trình 1.44, có giá trị nằm giữa  $\alpha_A$  và  $\alpha_B$ .

Nếu như một cấu tử trong hệ có độ bay hơi tương đối trong khoảng độ bay hơi tương đối của cấu tử nhẹ và cấu tử nặng chủ đạo, thì cần phải thử hai giá trị của  $\theta$ .

#### Ví dụ 1.5

Giả sử có một hỗn hợp gồm hexan, heptan và octan cần được tách để thu được sản phẩm như trong bảng sau thì giá trị tỉ số hồi lưu cực tiểu khi vận hành cột chưng cất hệ này sẽ là bao nhiêu nếu như nguyên liệu được đưa vào cột ở nhiệt độ sôi của nó.

| Cấu tử | Nguyên liệu |       | Sản phẩm đầu cột |       | Sản phẩm đáy cột |       | Độ bay hơi tương đối |
|--------|-------------|-------|------------------|-------|------------------|-------|----------------------|
|        | F mol       | $x_f$ | D kmol           | $x_d$ | W kmol           | $x_w$ |                      |
| Hexan  | 40          | 0,40  | 40               | 0,534 | 0                | 0     | 2,70                 |
| Heptan | 35          | 0,35  | 34               | 0,453 | 1                | 0,04  | 2,22                 |
| Octan  | 25          | 0,25  | 1                | 0,013 | 24               | 0,96  | 1,00                 |

#### Lời giải

Thay các giá trị đã biết vào phương trình 1.44 với cấu tử nhẹ chủ đạo A là heptan, cấu tử nặng chủ đạo B là octan và  $q = 1$  (nguyên liệu được đưa vào tại điểm sôi của nó):

$$\frac{2,70 \times 0,40}{2,70 - \theta} + \frac{2,22 \times 0,35}{2,22 - \theta} + \frac{1 \times 0,25}{1 - \theta} = 0$$

Giá trị của  $\theta$  phải thoả mãn phương trình  $\alpha_A < \theta < \alpha_B$ , trong bài toán này  $1,0 < \theta < 2,22$ . Thử với  $\theta = 1,15$  thì:

$$\sum \frac{\alpha x_i}{\alpha - \theta} = -0,243$$

Thử với  $\theta = 1,17$  thì:

$$\sum \frac{\alpha x_i}{\alpha - \theta} = -0,024$$

Như vậy, giá trị  $\theta = 1,17$  thì gần phù hợp với phương trình, thay vào phương trình 1.45 nhận được:

$$\frac{2,70 \times 0,534}{2,70 - 1,17} + \frac{2,22 \times 0,453}{2,22 - 1,17} + \frac{1,00 \times 0,013}{1,00 - 1,17} = 1,827$$

$$\text{Vậy } R_m = 1,827$$

### 1.3.7. Tính số đĩa lý thuyết khi dòng hồi lưu hoàn toàn

Số đĩa lý thuyết cần thiết để đáp ứng một yêu cầu tách để ra khi dòng hồi lưu hoàn toàn được tính từ phương trình Fenske (phương trình 1.36) áp dụng cho hai cấu tử chủ đạo của hỗn hợp đa cấu tử:

$$n + 1 = \frac{\log \left[ \left( \frac{x_A}{x_B} \right)_d \left( \frac{x_B}{x_A} \right)_s \right]}{\log \alpha_{AB}} \quad (1.46)$$

#### Ví dụ 1.6

Để tách các cấu tử hexan, heptan và octan như trong ví dụ trên thì cần tối thiểu bao nhiêu đĩa lý thuyết?

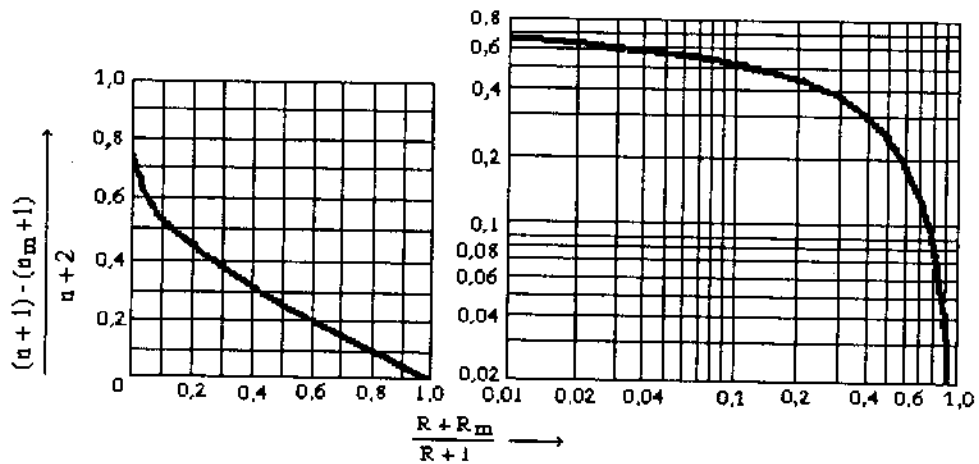
#### Lời giải

$$n + 1 = \frac{-\log \left[ \begin{matrix} 0,453 & 0,960 \\ 0,013 & 0,040 \end{matrix} \right]}{\log 2,22} = 8,5$$

Như vậy, số đĩa lý thuyết cực tiểu = 7,5; hay có thể nói cần tối thiểu 8 đĩa lý thuyết để thực hiện yêu cầu tách đặt ra.



### 1.3.8. Mối quan hệ giữa số đĩa lý thuyết cực tiểu và tỉ số hồi lưu cực tiểu



Hình 1.11: Mối quan hệ giữa số đĩa lý thuyết và tỉ số hồi lưu.

Gilliland đã đưa ra phương trình thực nghiệm để xác định mối quan hệ giữa số đĩa lý thuyết và tỉ số hồi lưu (hình 1.11)

#### Ví dụ 1.6

Sử dụng ví dụ 1.5 hãy xét sự thay đổi  $n$  với  $R$  (chú ý  $R_m = 1,83$  và  $n_m = 7,5$ )

| Giá trị $R$ | $\frac{R - R_m}{R + 1}$   | $\frac{(n+1) - (n_m+1)}{n+2}$ | $n$  |
|-------------|---------------------------|-------------------------------|------|
| 1           | $\frac{0,17}{2} = 0,085$  | 0,55                          | 19   |
| 2           | $\frac{1,17}{3} = 0,390$  | 0,32                          | 11,8 |
| 5           | $\frac{4,17}{6} = 0,695$  | 0,15                          | 9,1  |
| 10          | $\frac{9,17}{11} = 0,833$ | 0,08                          | 8,2  |

## BÀI TẬP CHƯƠNG 1

### Bài 1.1

Một hỗn hợp lỏng chứa 4 cấu tử A, B, C, và D, trong hỗn hợp đó mỗi cấu tử A, B, C chiếm 0,3 phần mol, được chưng cất liên tục để thu được sản phẩm ở đầu cột 0,9 phần mol cấu tử A, còn lại là cấu tử B. Sản phẩm ở cuối cột chứa không quá 0,05 phần mol cấu tử A. Hãy tính tỉ số hồi lưu cần cho yêu cầu tách trên nếu độ bay hơi tương đối giữa A và B là 2.

### Bài 1.2

Trong quá trình chưng cất một hỗn hợp gồm hai cấu tử thu được sản phẩm đầu cột chứa 0,6 phần mol cấu tử dễ bay hơi, sản phẩm đáy chứa 0,4 phần mol cấu tử dễ bay hơi. Nếu tỉ số hồi lưu của cột cất này là 20:1 và quan hệ giữa thành phần hơi  $y$  và thành phần lỏng  $x$  theo phương trình  $y = 1,035x$ . Hãy xác định số đĩa lý thuyết của cột đó.

### Bài 1.3

Một hỗn hợp nước và etyl ancol chứa 0,16 mol etyl ancol được chưng cất liên tục trong một cột chưng cất kiểu đĩa cho sản phẩm đầu cột chứa 0,77 phần mol ancol và trong sản phẩm đáy cột chứa 0,02 phần mol ancol. Giả sử rằng 25% ancol được lấy ra theo một đường phụ và trong dòng này thì ancol chiếm 0,5 phần mol.

Hãy xác định số đĩa lý thuyết cần thiết cho yêu cầu tách trên và vị trí đĩa lấy sản phẩm ra theo dòng phụ biết rằng nguyên liệu được đưa vào tại nhiệt độ sôi của nó và tỉ số hồi lưu của cột là 2.

### Bài 1.4

Một hỗn hợp được đưa vào một cột chưng cất liên tục. Trong đó, số phần mol của phenol là 0,35, của *o*-cresol là 0,15, của *m*-cresol là 0,30 và của xylene là 0,20. Người ta dự định thu sản phẩm đầu cột có số phần mol của phenol là 0,952, của *o*-cresol là 0,0474, và *m*-cresol là 0,0006. Nếu như độ bay hơi tương đối của phenol đối với *o*-cresol là 1,26 và của *m*-cresol đối với

*o*-cresol là 0,70. Tìm xem cần khoảng bao nhiêu đĩa lý thuyết để đáp ứng yêu cầu tách trên nếu dòng hồi lưu hoàn toàn.

### **Bài 1.5**

Một cột chưng cất liên tục vận hành ở áp suất khí quyển được thiết kế để chưng cất hỗn hợp của  $\text{CS}_2$  và  $\text{CCl}_4$  trong đó  $\text{CS}_2$  chiếm 15,67% để thu sản phẩm đầu cột chứa 91%  $\text{CS}_2$  và sản phẩm cuối cột chứa 97,3%  $\text{CCl}_4$  (tính theo phần trăm trọng lượng). Giả sử rằng hiệu suất của đĩa là 70% và cột làm việc với tỉ số hồi lưu là 3,16 kmol/kmol sản phẩm.

Sử dụng dữ liệu về đường cong cân bằng lỏng - hơi hãy xác định số đĩa lý thuyết cần thiết cho nhiệm vụ đề ra.

Biết rằng nguyên liệu được đưa vào ở 290K và lượng nhiệt cần thiết để đưa nhiên liệu đến nhiệt độ sôi của nó ở 336K là 1,7kJ/kg.K. Nhiệt hóa hơi của  $\text{CS}_2$  và  $\text{CCl}_4$  là 25.900 kJ/kmol.

Dữ liệu đường cong cân bằng lỏng - hơi của hệ hai cấu tử  $\text{CS}_2$  và  $\text{CCl}_4$  như sau:

|    |   |      |       |       |       |       |      |       |       |       |       |
|----|---|------|-------|-------|-------|-------|------|-------|-------|-------|-------|
| x% | 0 | 2,96 | 6,15  | 11,06 | 14,35 | 25,85 | 39,0 | 53,18 | 66,30 | 75,75 | 86,04 |
| y% | 0 | 8,23 | 15,55 | 26,6  | 33,2  | 49,5  | 63,4 | 74,7  | 82,9  | 87,8  | 93,2  |

### **Bài 1.6**

Một cột chưng cất được sử dụng để tách một hỗn hợp chứa 0,695 phần mol *n*-heptan ( $\text{C}_7\text{H}_{16}$ ) và 0,305 phần mol *n*-octan ( $\text{C}_8\text{H}_{18}$ ) để cho sản phẩm tinh khiết đến 0,99 phần mol. Cột này được vận hành ở áp suất 101,3 kN/m<sup>2</sup> với tốc độ hơi là 0,6 m/s. Nguyên liệu ở trạng thái lỏng ở tại điểm sôi của nó và được nạp với tốc độ 1,25 kg/s. Nhiệt độ sôi ở đỉnh cột là 372K.

Dữ liệu cân bằng lỏng-hơi:

|   |      |      |      |      |      |      |      |      |
|---|------|------|------|------|------|------|------|------|
| y | 0,96 | 0,91 | 0,83 | 0,74 | 0,65 | 0,50 | 0,37 | 0,24 |
| x | 0,92 | 0,82 | 0,69 | 0,57 | 0,46 | 0,32 | 0,22 | 0,13 |

- a) Xác định  $R_{\min}$ .
- b) Xác định đường kính cột khi  $v = 2R_{\min}$ .

### **Bài 1.7**

Để tách một hỗn hợp gồm 40% khối lượng benzen và phần còn lại là toluen người ta sử dụng một cột cất liên tục với tốc độ 4 kg/s, cho sản phẩm đầu cột chứa 97% khối lượng benzen và sản phẩm cuối cột chứa 98% khối lượng toluen. Nguyên liệu được nạp vào ở trạng thái lỏng tại điểm sôi của nó.

Dữ liệu cân bằng lỏng-hơi của hệ benzen-toluen:

|   |      |      |      |      |      |      |      |      |      |
|---|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| x | 0,10 | 0,20 | 0,30 | 0,40 | 0,50 | 0,60 | 0,70 | 0,80 | 0,90 |
| y | 0,22 | 0,38 | 0,51 | 0,63 | 0,70 | 0,78 | 0,85 | 0,91 | 0,96 |

- a) Tính năng suất sản phẩm đầu cột và cuối cột (theo đơn vị khối lượng).
- b) Nếu tỉ số hồi lưu là 3,5 thì cột cất này cần có bao nhiêu đĩa để đáp ứng được yêu cầu tách trên.
- c) Tìm số đĩa thực nếu độ hiệu dụng của đĩa là 60%.

### **Bài 1.8**

Người ta chưng cất một hỗn hợp benzen và toluen trong đó benzen chiếm 0,35 phần mol trong một cột chưng cất. Người ta dự định thu sản phẩm đầu cột chứa 0,95 phần mol benzen và sản phẩm đáy cột chứa không quá 0,05 phần mol benzen. Cột này làm việc với tỉ số hồi lưu là 3,2.

Giả sử hiệu suất của đĩa là 60%, hãy xác định số đĩa thực tế cần dùng và vị trí đĩa nạp nguyên liệu để đáp ứng yêu cầu tách đặt ra.

Dữ liệu cân bằng lỏng-hơi của hệ benzen-toluen như sau:

|   |      |      |      |      |      |      |      |      |      |
|---|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| x | 0,10 | 0,20 | 0,3  | 0,40 | 0,50 | 0,60 | 0,70 | 0,80 | 0,90 |
| y | 0,22 | 0,38 | 0,51 | 0,63 | 0,70 | 0,78 | 0,85 | 0,91 | 0,96 |

**Bài 1.9**

Bảng sau đây cho biết mối quan hệ giữa phần mol cacbon disunfua ( $\text{CS}_2$ ) trong pha lỏng và pha hơi khi chưng cất hỗn hợp gồm cacbon disunfua và tetraclorua cacbon ( $\text{CCl}_4$ ):

|   |       |       |       |       |       |       |
|---|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| X | 0,000 | 0,200 | 0,400 | 0,600 | 0,800 | 1,000 |
| Y | 0,000 | 0,445 | 0,650 | 0,795 | 0,910 | 1,000 |

Cho biết:

Tỉ số hồi lưu bằng 3, độ dốc của đường làm việc dưới bằng 1,4 và sản phẩm của quá trình chưng cất đạt độ tinh khiết đến 99%.

a) Xác định số đĩa lý thuyết cần thiết cho yêu cầu tách trên theo phương pháp McCabe-Thiele.

b) Tìm độ dốc nhỏ nhất của đường làm việc trên.

**Bài 1.10**

Người ta dùng cột chưng cất phân đoạn để chưng cất một hỗn hợp chứa 25% benzen và 75% toluen tính theo khối lượng. Cột được vận hành ở tỉ số hồi lưu là 3,5 và nguyên liệu được đưa vào tại nhiệt độ sôi của nó. Yêu cầu của sản phẩm đầu cột là benzen chiếm 90%.

Hãy xác định thành phần của pha lỏng ở đĩa thứ ba theo phương pháp Lewis-Sorrel nếu giả thiết rằng đĩa làm việc với hiệu suất 100%. Bằng phương pháp McCabe-Thiele, hãy xác định số đĩa lý thuyết cần thiết để đáp ứng yêu cầu tách đề ra.

**Bài 1.11**

Một hỗn hợp lỏng chứa 0,3 phần mol benzen và phần còn lại là toluen được đưa vào một cột chưng cất liên tục. Người ta dự định thu sản phẩm đầu cột có thành phần benzen chiếm 0,90 phần mol và sản phẩm cuối cột có thành phần toluen chiếm 0,95 phần mol. Nếu cột được vận hành ở tỉ số hồi lưu là 5 thì sẽ cần bao nhiêu đĩa lý thuyết để đáp ứng nhiệm vụ đề ra trong các trường hợp:

- a) Nguyên liệu được đưa vào ở trạng thái hơi bão hòa.
- b) Nguyên liệu được đưa vào ở trạng thái lỏng tại nhiệt độ 283K.

Biết rằng nhiệt hóa hơi của benzen và toluen  $\lambda = 30$  MJ/kmol, lượng nhiệt cần thiết để đưa 1 kg nhiên liệu lên 1K là 1,84 (kJ/kg.K). Nhiệt độ sôi của benzen và toluen tương ứng là 353,3K và 383,8K.

### **Bài 1.12**

Một hỗn hợp gồm ancolol và nước trong đó ancolol chiếm 0,45 phần mol được chưng cất liên tục để thu sản phẩm đầu cột chứa 0,825 phần mol ancolol và sản phẩm đáy cột chỉ chứa 0,05 phần mol của nó.

Cần bao nhiêu đĩa lý thuyết để đáp ứng yêu cầu tách đề ra nếu cột làm việc ở tỉ số hồi lưu bằng 3?

### **Bài 1.13**

Một hỗn hợp gồm 0,6 phần mol benzen, 0,3 phần mol toluen và còn lại là xylen được tách bằng phương pháp chưng cất. Nếu sản phẩm đầu cột chứa 0,99 phần mol benzen, hãy xác định:

- a) Thành phần lỏng ở mỗi đĩa nếu dòng hồi lưu hoàn toàn.
- b) Thành phần ở đĩa thứ hai và đĩa thứ tư nếu tỉ số hồi lưu là 1,5.
- c) Câu b với tỉ số hồi lưu là 5.
- d) Câu b với tỉ số hồi lưu là 8 và giả sử hàm lượng benzen là 10% trong sản phẩm cuối cột.

Câu d với tỉ số hồi lưu là 5.

Biết rằng độ bay hơi tương đối của benzen so với toluen là 2,4, còn của xylen là 0,43

### **Bài 1.14**

Một cột chưng cất liên tục được thiết kế để tách các hỗn hợp lỏng của hai cấu tử trong đó cấu tử dễ bay hơi hơn chiếm 0,5 phần mol và thu sản phẩm đầu cột chứa 0,9 phần mol cấu tử dễ bay hơi hơn còn sản phẩm đáy cột chứa 0,1 phần mol của nó.

Hãy tính thành phần pha lỏng ở đĩa lý thuyết thứ ba tính từ đỉnh cột nếu cột chưng cất được vận hành ở tỉ số  $L_n/D$  là 3,5 trong các trường hợp:

- a) hỗn hợp đó là toluen-benzen;  
 b) hỗn hợp đó là *n*-heptan-toluen.

Dữ liệu về đường cong cân bằng lỏng-hơi của hệ benzen-toluen trong bài 1.8, còn dữ liệu về cân bằng lỏng - hơi của hệ *n*-heptan-toluen được cho trong bảng sau:

| T, K | $10^3 T$ | $P_H^0$ | $P_T^0$ |
|------|----------|---------|---------|
| 370  | 2,7      | 730     | 510     |
| 333  | 3,0      | 200     | 135     |
| 303  | 3,3      | 55      | 35      |
| 278  | 3,6      | 15      | 9,4     |

### **Bài 1.15**

Một hỗn hợp chứa 40% mol benzen và phần còn lại là toluen được chưng cất trong một cột cất phân đoạn và cho sản phẩm đầu cột chứa 95% mol benzen và sản phẩm đáy cột chứa 5% mol benzen, tỉ số hồi lưu là 4.

- a) Áp dụng phương pháp Sorel hãy tính thành phần của đĩa thứ hai kể từ đỉnh cột xuống.  
 b) Áp dụng phương pháp McCabe-Thiele để xác định số đĩa lý thuyết cần thiết để đáp ứng yêu cầu tách trên và vị trí nạp liệu nếu nguyên liệu ở trạng thái lỏng và được nạp vào tại điểm sôi của nó.  
 c) Tìm tỉ số hồi lưu cực tiểu.  
 d) Tìm số đĩa lý thuyết cực tiểu.  
 e) Hãy tìm số đĩa lý thuyết để đáp ứng yêu cầu tách đề ra nếu nguyên liệu được nạp vào ở nhiệt độ 288K khi tỉ số hồi lưu vẫn là 4.

### **Bài 1.16**

Một hỗn hợp lỏng gồm phenol, các cresol và một lượng nhỏ các xyleneol được đem tách bằng phương pháp chưng cất và cho sản phẩm đầu cột chứa

95,3% mol phenol. Thành phần của sản phẩm đầu cột và sản phẩm đáy cột cho trong bảng dưới.

Tỉ số hồi lưu là 10 và *m*-cresol được coi là cấu tử nặng, phenol được coi là cấu tử nhẹ.

- Lập phương trình cân bằng vật chất khi lượng nguyên liệu là 100 kmol.
- Tính thành phần của đĩa thứ hai kể từ đỉnh cột.
- Tính thành phần của đĩa thứ hai kể từ đáy cột.
- Tính tỉ số hồi lưu cực tiểu theo phương trình Underwood.

| Cấu tử           | T/p nguyên liệu, % | T/p sản phẩm đầu cột, % | T/p sản phẩm đáy cột, % | Độ bay hơi tương đối $\alpha$ |
|------------------|--------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------------|
| phenol           | 35                 | 95,30                   | 5,24                    | 1,25                          |
| <i>o</i> -cresol | 15                 | 4,55                    |                         | 1,00                          |
| <i>m</i> -cresol | 30                 | 0,15                    |                         | 0,63                          |
| các xylen        | 20                 |                         |                         | 0,37                          |
|                  | 100                | 100                     |                         |                               |

### **Bài 1.17**

Một cột chưng cất phân đoạn được thiết kế với hiệu suất tách 2,5kg nguyên liệu/s, nguyên liệu này chứa 60% toluen và 40% benzen để thu sản phẩm đầu cột chứa 97%benzen và sản phẩm cuối cột chứa 98% toluen.

Cột được vận hành với tỉ số hồi lưu là 3,5 và nhiệt hoá hơi của hỗn hợp này khoảng 30 MJ/kmol.

Hãy tính:

- Hiệu suất thu hồi sản phẩm đầu cột và hiệu suất thu hồi sản phẩm cuối cột.
- Số đĩa lý thuyết và vị trí nạp nguyên liệu nếu nguyên liệu được nạp vào ở nhiệt độ 295K và lượng nhiệt cần thiết để 1 kg nguyên liệu tăng lên 1K là 1,84 kJ.



- c) Cần cung cấp cho cột chưng cất một lượng hơi nước là bao nhiêu nếu cột làm việc ở áp suất 240 kN/m<sup>2</sup>.
- d) Xác định đường kính của cột nếu cột được vận hành ở áp suất khí quyển và tốc độ bay hơi là 1 m/s.

**Bài 1.18**

Một hỗn hợp lỏng chứa 10% *o*-xylen, 65% *m*-xylen, 17% *p*-xylen, 4% benzen và 4% etyl benzen tính theo phần mol được dùng làm nguyên liệu cho chưng cất. Nếu dòng hồi lưu hoàn toàn thì cột cất cần bao nhiêu đĩa lý thuyết để cho sản phẩm có 80% *m*-xylen và 14% *p*-xylen. Biết rằng độ bay hơi tương đối của hai cấu tử này là 1,0101.

**Bài 1.19**

Bảng áp suất hơi của *n*-pentan và *n*-hexan:

| Áp suất, kN/m <sup>2</sup>         | 1,3   | 2,6   | 5,3   | 8,0   | 13,3  | 26,6  | 53,2  | 101,3 |
|------------------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> , K | 223,1 | 233,0 | 244,0 | 251,0 | 260,6 | 275,1 | 291,7 | 309,3 |
| C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> , K | 248,2 | 259,1 | 276,9 | 279,0 | 289,0 | 304,8 | 322,8 | 341,9 |

Dữ liệu về đường cong cân bằng lỏng-hơi tại áp suất khí quyển:

|   |      |      |      |      |       |      |       |       |       |
|---|------|------|------|------|-------|------|-------|-------|-------|
| y | 0,21 | 0,41 | 0,54 | 0,66 | 0,745 | 0,82 | 0,875 | 0,925 | 0,975 |
| x | 0,1  | 0,2  | 0,3  | 0,4  | 0,5   | 0,6  | 0,7   | 0,8   | 0,9   |

- a) Hãy xác định độ bay hơi tương đối của pentan đối với hexan ở nhiệt độ 237, 293, 313K.
- b) Một hỗn hợp chứa 0,52 phần mol pentan được chưng cất liên tục trong một cột để thu sản phẩm đầu cột chứa 0,95 phần mol pentan và sản phẩm đáy cột chứa 0,1 phần mol của nó. Hãy xác định số đĩa lý thuyết cực tiểu (số đĩa lý thuyết khi dòng hồi lưu hoàn toàn) bằng phương pháp McCabe-Thiele.

- c) Sử dụng các dữ kiện như trong câu (b) để xác định thành phần lỏng của đĩa thứ hai tính từ đỉnh cột xuống bằng phương pháp Lewis khi cột được vận hành ở tỉ số hồi lưu bằng 2.
- d) Sử dụng các điều kiện như trong câu (b) xác định số đĩa lý thuyết cần thiết và vị trí nạp nguyên liệu để đáp ứng yêu cầu tách đề ra khi tỉ số hồi lưu là 2.

Giả thiết rằng trong tất cả các trường hợp này thì nguyên liệu được đưa vào ở trạng thái lỏng và tại nhiệt độ sôi của nó.

### **Bài 1.20**

Áp suất hơi của *n*-pentan và *n*-hexan được cho trong bảng sau:

|                                     |       |       |       |       |       |       |       |       |
|-------------------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| $P^0, \text{kN/m}^2$                | 1,3   | 2,6   | 5,3   | 8,0   | 13,3  | 26,6  | 53,2  | 101,3 |
| $\text{C}_5\text{H}_{12}, \text{K}$ | 223,1 | 233,0 | 244,0 | 251,0 | 260,6 | 275,1 | 291,7 | 309,3 |
| $\text{C}_6\text{H}_{14}, \text{K}$ | 248,2 | 259,1 | 276,9 | 279,0 | 289,0 | 304,8 | 322,8 | 341,9 |

Giả sử rằng cả định luật Raoult và định luật Dalton áp dụng đúng cho trường hợp này.

- a) Hãy vẽ đường cong cân bằng lỏng-hơi ở áp suất 13,3 kN/m<sup>2</sup>.
- b) Biểu diễn độ bay hơi tương đối của hai cấu tử này ở áp suất 13,3 kN/m<sup>2</sup> theo thành phần pha lỏng.
- c) Liệu có gây ra một sự sai lệch nào không nếu giả sử rằng độ bay hơi tương đối là không đổi tại giá trị trung bình của nó?
- d) Nếu hỗn hợp được chưng cất ở áp suất cao hơn thì có ưu điểm gì hơn không?

## CHƯƠNG 2

### PHƯƠNG PHÁP HẤP THỤ

Việc tách một hoặc một số cấu tử ra khỏi hỗn hợp khí bằng cách cho hấp thụ qua một dung dịch phù hợp được gọi là quá trình hấp thụ khí.

#### 2.1. Các điều kiện cân bằng giữa pha lỏng và pha khí

Khi hai pha tiếp xúc với nhau chúng có xu hướng tạo cân bằng giữa hai pha. Ví dụ nước khi tiếp xúc với không khí thì nước sẽ bay hơi cho đến khi không khí bão hòa hơi nước, ngược lại nước cũng hấp thụ các cấu tử trong hỗn hợp khí (không khí) cho đến khi nó bão hòa các cấu tử này.

Khi nồng độ của các cấu tử trong pha khí và pha lỏng đạt cân bằng thì mối quan hệ giữa nồng độ và áp suất hơi riêng phần của khí tuân theo định luật Henry:

$$P_A = H C_A \quad (2.1)$$

trong đó:

$P_A$  : là áp suất hơi riêng phần của cấu tử A trong pha khí;

$C_A$  : là nồng độ của cấu tử A trong pha lỏng;

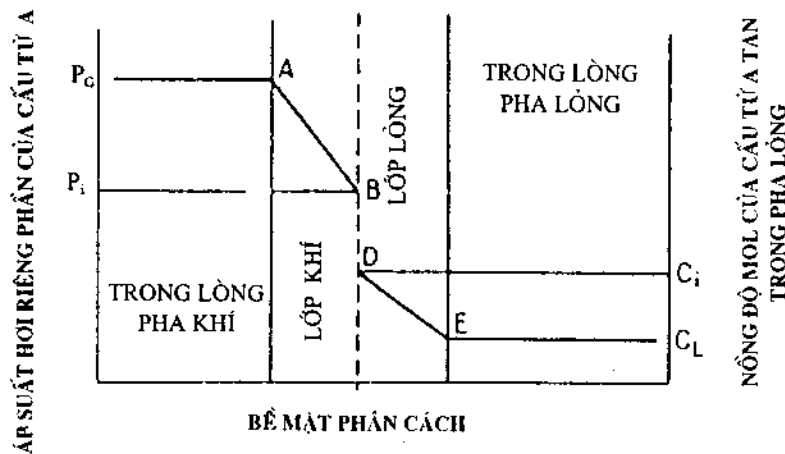
$H$  : là hằng số Henry.

#### 2.2. Cơ chế hấp thụ

##### 2.2.1. Lý thuyết hai lớp

Theo lý thuyết này thì các chất được chuyển trong các pha nhờ các dòng đối lưu và sự khác biệt về nồng độ được xem như là không đáng kể trừ

vùng lân cận của bề mặt ngăn cách giữa hai pha. Giả sử tại bề mặt ngăn cách giữa hai pha này không có các dòng mà chỉ tồn tại một lớp mỏng của chất lỏng và tại đây quá trình chuyển chất giữa hai pha chỉ do quá trình khuếch tán phân tử. Lớp này dày hơn một chút so với lớp chất lỏng bên dưới bởi vì nó có một độ cản trở tương đương với lớp liên kết. Theo định luật Fick, tốc độ chuyển chất giữa hai pha bằng quá trình khuếch tán tỉ lệ với gradient nồng độ tại bề mặt tiếp giáp giữa hai pha, nơi quá trình khuếch tán xảy ra.



Hình 2.1: Nồng độ của chất bị hấp thụ A.

### 2.2.2. Tốc độ hấp thụ

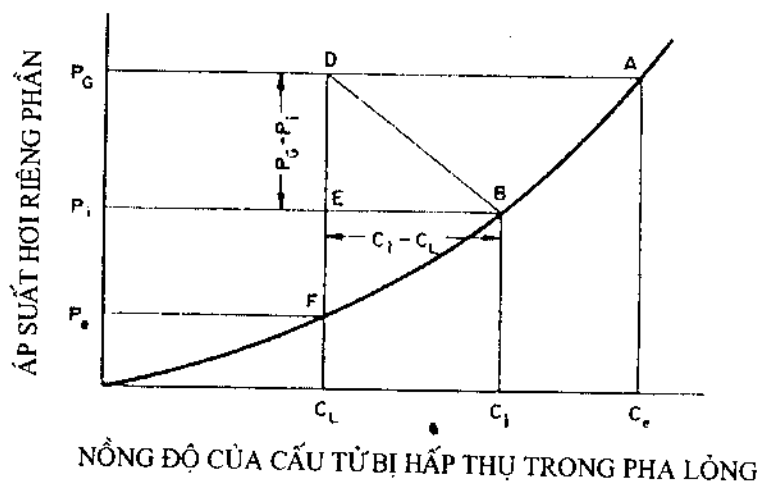
Đối với một quá trình hấp thụ ở trạng thái dừng, tốc độ chuyển các phân tử khí qua lớp màng khí sẽ tương tự như qua lớp màng lỏng và phương trình chung áp dụng cho quá trình chuyển khối có thể được viết như sau:

$$N'_A = k_G [P_G - P_i] = k_L [C_i - C_L] \quad (2.2)$$

Trong đó  $P_G$  là áp suất riêng phần trong khối khí,  $C_L$  là nồng độ trong lòng pha lỏng, còn  $P_i$  và  $C_i$  là các giá trị tương ứng ở bề mặt phân cách pha, ở đó tồn tại trạng thái cân bằng. Như vậy,

$$\frac{k_G}{k_L} = \frac{C_i - C_L}{P_G - P_i} \quad (2.3)$$

Phương trình này được minh họa qua hình 2.2, trong đó ABF là đường cong cân bằng.



**Hình 2.2:** Lực chuyển chất trong pha lỏng và pha khí.

trong hình 2.2:

Điểm D ( $C_L, P_G$ ) biểu diễn điều kiện trong lòng pha lỏng và pha khí;

$P_G$  là áp suất riêng phần của cấu tử A trong lòng pha khí;

$C_L$  là nồng độ trung bình của cấu tử A trong lòng pha lỏng;

Điểm A ( $C_e, P_G$ ) biểu diễn nồng độ  $C_e$  trong pha lỏng ở trạng thái cân bằng với  $P_G$  trong pha khí;

Điểm B ( $C_i, P_i$ ) biểu diễn nồng độ  $C_i$  trong pha lỏng ở trạng thái cân bằng với  $P_i$  trong pha khí;

Điểm F ( $C_L, P_e$ ) biểu diễn áp suất riêng phần  $P_e$  trong pha khí nằm cân bằng với  $C_L$  trong pha lỏng.

Động lực gây ra sự chuyển pha trong pha khí:

$$(P_G - P_i) \equiv DE$$

và động lực gây ra sự chuyển pha trong pha lỏng:

$$(C_i - C_L) \equiv BE$$

Suy ra:

$$\frac{P_G - P_i}{C_i - C_L} = \frac{k_L}{k_G}$$

Như vậy, nồng độ của chất ở bề mặt phân cách pha (điểm B) được tìm thấy bằng cách vẽ một đường thẳng đi qua D, có độ dốc  $-k_L/k_G$  và cắt đường cong cân bằng tại điểm B.

### Hệ số tổng

Để nhận được một phép đo trực tiếp các giá trị  $k_L$ ,  $k_G$  cần đo nồng độ của chất ở bề mặt phân cách pha. Những giá trị này chỉ có thể nhận được trong những trường hợp rất đặc biệt và các hệ số tổng được định nghĩa như sau:

$$N'_A = K_G [P_G - P_e] = K_L [C_e - C_L] \quad (2.4)$$

trong đó:  $K_G$  và  $K_L$  được định nghĩa là hệ số tổng pha khí và pha lỏng.

Tốc độ chuyển pha của chất A được định nghĩa theo phương trình sau:

$$N'_A = k_G [P_G - P_i] = k_L [C_i - C_L] = K_G [P_G - P_e] = K_L [C_e - C_L] \quad (2.5)$$

Suy ra:

$$\begin{aligned} \frac{1}{K_G} &= \frac{1}{k_G} \left[ \frac{P_G - P_e}{P_G - P_i} \right] \\ &= \frac{1}{k_G} \left[ \frac{P_G - P_i}{P_G - P_i} \right] + \frac{1}{k_G} \left[ \frac{P_i - P_e}{P_G - P_i} \right] \end{aligned}$$

Mặt khác,

$$\frac{1}{k_G} = \frac{1}{k_L} \left[ \frac{P_G - P_i}{C_i - C_L} \right]$$

Kết hợp hai phương trình trên nhận được:

$$\begin{aligned} \frac{1}{K_G} &= \frac{1}{k_G} + \frac{1}{k_L} \left[ \frac{P_G - P_e}{C_i - C_L} \right] \left[ \frac{P_i - P_e}{C_G - C_i} \right] \\ &= \frac{1}{k_G} + \frac{1}{k_L} \left[ \frac{P_i - P_e}{C_i - C_L} \right] \end{aligned}$$

Nhưng  $(P_i - P_o)/(C_i - C_L)$  là độ dốc trung bình của đường cong cân bằng và khi dung dịch tuân theo định luật Henry:  $H = dP/dC \approx (P_i - P_o)/(C_i - C_L)$  nên:

$$\frac{1}{K_G} = \frac{1}{k_G} + \frac{H}{k_L} \quad (2.6)$$

Một cách tương tự suy ra:

$$\frac{1}{K_L} = \frac{1}{k_L} + \frac{1}{Hk_G} \quad (2.7)$$

Suy ra:

$$\frac{1}{K_G} = \frac{H}{K_L} \quad (2.8)$$

### **\*.Tốc độ hấp thụ tính theo phân số mol**

Các phương trình chuyển khối được viết như sau:

$$N'_A = k_G''(y - y_i) = K_G''(y - y_e) \quad (2.9)$$

và

$$N'_A = k_L''(x_i - x) = K_L''(x_e - x) \quad (2.10)$$

trong đó:  $x, y$  là phân số mol tương ứng của cấu tử A trong pha lỏng và trong pha hơi.

$k_G'', k_L'', K_G'', K_L''$  là các hệ số chuyển pha được xác định theo phân số mol.

Nếu  $m$  là độ dốc của đường cong cân bằng [xấp xỉ  $(y_i - y_e)/(x_i - x)$ ] và có thể được viết như sau:

$$\frac{1}{K_G''} = \frac{1}{k_G''} + \frac{m}{k_L''} \quad (2.11)$$

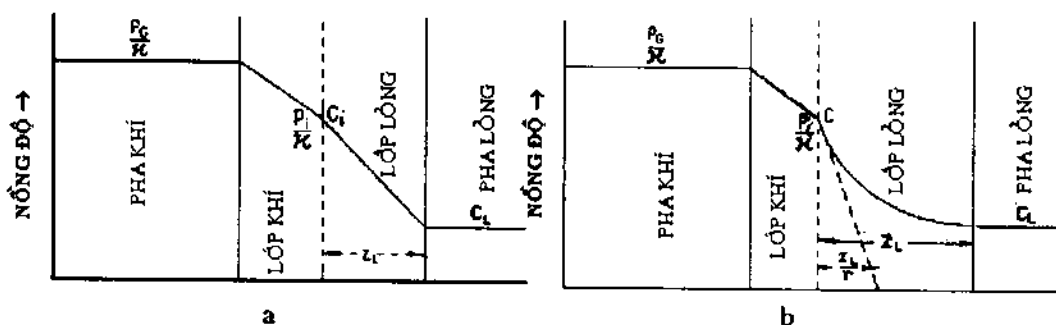
Đối với mỗi hệ thống,  $m$  có giá trị xác định.

## **2.3. Hấp thụ kết hợp với phản ứng hóa học**

Trong các phần trước, quá trình hấp thụ khí mới chỉ xét đến quá trình vật lý. Tuy nhiên, có một số trường hợp trong quá trình hấp thụ một hoặc một







**Hình 2.4:** Nồng độ hấp thụ: (a) quá trình hấp thụ không kèm theo phản ứng hóa học; (b) quá trình hấp thụ kèm theo phản ứng hóa học.

Sự khác nhau giữa một quá trình hấp thụ thuần túy vật lý với một quá trình hấp thụ kèm theo phản ứng hóa học được biểu diễn qua hình 2.4a và 2.4b. Hình vẽ 2.4a biểu diễn nồng độ đối với quá trình hấp thụ thuần túy lý thuyết trong khi hình 2.4b biểu diễn quá trình hấp thụ có kèm theo phản ứng hóa học. Đối với quá trình chuyển pha trong pha khí:

$$N'_A = k_G (P_G - P_i) \quad (2.12)$$

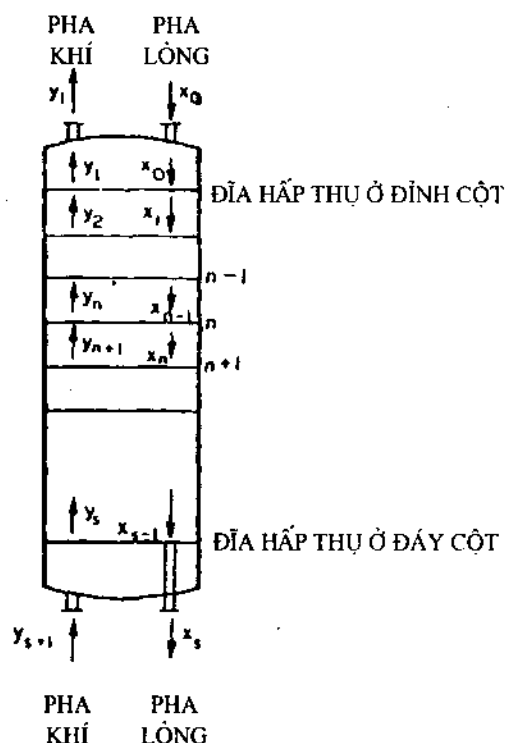
còn đối với quá trình chuyển pha trong pha lỏng:

$$N'_A = k_L (C_i - C_L) \quad (2.13)$$

Ảnh hưởng của phản ứng hóa học là làm tăng việc vận chuyển chất A ra khỏi bề mặt phân cách pha.

## 2.4. Cột hấp thụ kiểu đĩa

Cột hấp thụ kiểu đĩa được sử dụng phổ biến đối với những cột hấp thụ có đường kính lớn hơn 2 m. Sơ đồ một cột hấp thụ kiểu đĩa được minh họa trong hình vẽ 2.5.



**Hình 2.5:** Cột hấp thụ kiểu đĩa.

Trong hình 2.5:

$L_m$  là tốc độ dòng tính theo đơn vị mol trên đơn vị diện tích chất lỏng;

$G_m$  là tốc độ dòng tính theo đơn vị mol trên một đơn vị diện tích chất rắn;

$n$  là số thứ tự đĩa tính từ đỉnh cột xuống;

$x$  là số phần mol của cấu tử được hấp thụ trong pha lỏng;

$y$  là số phần mol của cấu tử được hấp thụ trong pha khí;

$s$  là tổng số đĩa lý thuyết trong cột.

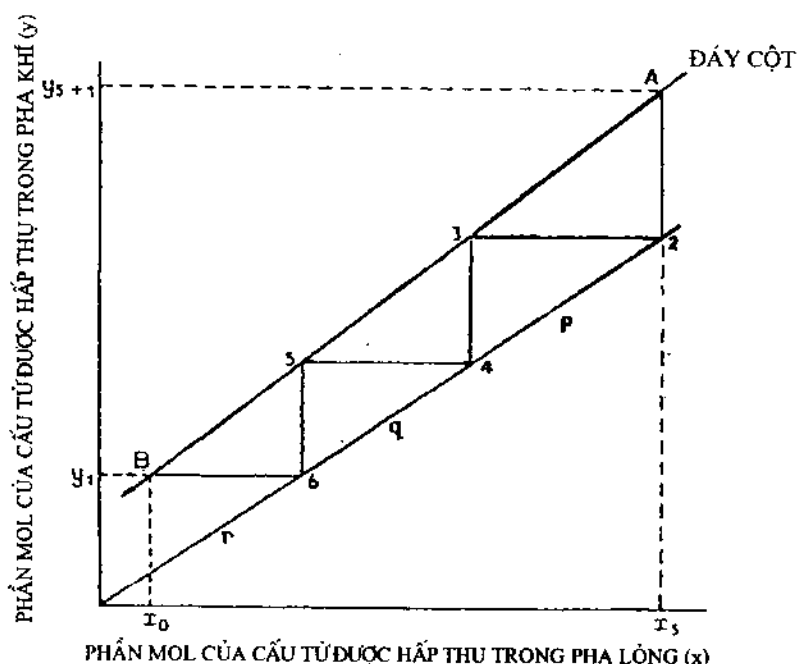
Nếu ta giả sử rằng các dung dịch lỏng được sử dụng sao cho số phần mol và tỉ số mol là xấp xỉ tương đương nhau. Mỗi một đĩa được coi như một đơn vị "lý tưởng", như vậy dòng khí có thành phần  $y_n$  khi rời đĩa thì cân bằng với dòng chất lỏng có thành phần  $x_n$  khi rời đĩa.

Như vậy, cân bằng vật chất viết cho cấu tử được hấp thụ ở đĩa  $n$  như sau:

$$G_m y_n + L_m x_s = G_m y_{s+1} + L_m x_{n-1} \quad (2.14)$$

$$\Rightarrow y_n = \frac{L_m}{G_m} x_{n-1} + y_{s+1} - \frac{L_m}{G_m} x_s \quad (2.15)$$

Phương trình (2.15) là phương trình đường thẳng có độ dốc  $L_m/G_m$ , phương trình này cho biết quan hệ giữa thành phần khí đi vào đĩa và thành phần lỏng rời đĩa. Phương trình này còn được gọi là phương trình đường làm việc. Đường làm việc này đi qua điểm A ( $x_s; y_{s+1}$ ) và điểm B ( $x_0; y_1$ ) (xem hình 2.6).



**Hình 2.6:** Số bậc hấp thụ được xác định theo phương pháp đồ thị.

Điểm A biểu diễn điều kiện ở đáy cột hấp thụ. Dòng khí đi từ đĩa ở đáy cột lên và cân bằng với dòng chất lỏng có nồng độ cấu tử bị hấp thụ  $x_s$  và được biểu diễn qua điểm 3 trên đường làm việc. Điểm 4 chỉ nồng độ của cấu tử bị

hấp thụ trong pha lỏng ở đĩa thứ hai tính từ đáy cột. Theo cách này, số bậc hấp thụ được vẽ từ điểm B theo chiều tăng của nồng độ cấu tử được hấp thụ trong pha khí.

**\* Tìm số bậc hấp thụ trong cột hấp thụ kiểu đĩa**

Nếu như đường cong cân bằng được biểu diễn bởi mối quan hệ  $y_e = mx$  (với  $m$  là hằng số phân bố tuân theo định luật Henry) thì số bậc hấp thụ cần thiết cho một quá trình hấp thụ ở một nhiệt độ cho trước có thể được xác định bằng phương pháp do Kremser, Souder và Brown đưa ra.

Cân bằng vật chất viết cho đĩa thứ  $n$ :

$$L_m(x_n - x_{n-1}) = G_m(y_{n+1} - y_n) \quad (2.16)$$

Đối với một bậc hấp thụ lý tưởng thì  $y_n = mx_n$ :

$$\frac{L_m}{mG_m}(y_n - y_{n-1}) = y_{n+1} - y_n \quad (2.17)$$

Đặt:

$$\frac{L_m}{mG_m} = A$$

Suy ra:

$$y_n = \frac{y_{n+1} + Ay_n}{1 + A} \quad (2.18)$$

Áp dụng phương trình này cho bậc hấp thụ ở đỉnh cột và gọi  $y_0$  là số phần mol của cấu tử được hấp thụ trong pha khí cân bằng với pha lỏng đi vào có nồng độ cấu tử được hấp thụ là  $x_0$ :

$$y_1 = \frac{y_2 + Ay_0}{1 + A}$$

Đối với đĩa thứ hai tính từ đỉnh cột xuống:

$$\begin{aligned} y_2 &= \frac{y_3 + Ay_1}{1 + A} \\ &= \frac{(1 + A)y_3 + Ay_2 + A^2y_0}{(1 + A)^2} \\ &= \frac{y_3(1 + A) + A^2y_0}{A^2 + A + 1} \end{aligned}$$

Đối với đĩa thứ ba từ đỉnh cột:

$$y_3 = \frac{y_4(1+A+A^2) + A^3 y_0}{A^3 + A^2 + A + 1}$$

Thực hiện biến đổi đại số biểu thức trên:

$$\begin{aligned} y_3 &= \frac{\left[ \frac{(A^3 - 1)}{(A - 1)} \right] y_4 + A^3 y_0}{\frac{(A^4 - 1)}{(A - 1)}} \\ &= \frac{(A^3 - 1)y_4 + A^3(A - 1)y_0}{(A^4 - 1)} \end{aligned}$$

Tiếp tục như vậy đến đĩa n nhận được:

$$y_n = \frac{(A^n - 1)y_{n+1} + A^n(A - 1)y_0}{A^{n+1} - 1}$$

Đặt:

$$x_n = \frac{y_n}{m}$$

$$x_n = \frac{(A^n - 1)y_{n+1} + A^n(A - 1)y_0}{m(A^{n+1} - 1)}$$

Mặt khác, do  $A(y_n - y_0) = y_{n+1} - y_1$  suy ra:

$$\begin{aligned} \frac{y_{n+1} - y_1 + Ay_0}{A} = y_n &= \frac{(A^n - 1)y_{n+1} + A^n(A - 1)y_0}{A^{n+1} - 1} \\ \Rightarrow y_1 &= y_{n+1} \left( \frac{A - 1}{A^{n+1} - 1} \right) + y_0 \left( \frac{A^{n+1} - A}{A^{n+1} - 1} \right) \end{aligned}$$

Vậy:

$$\begin{aligned} \frac{A - 1}{A^{n+1} - 1} &= 1 - \frac{A^{n+1} - A}{A^{n+1} - 1} \\ \Leftrightarrow y_1 &= y_{n+1} + (y_0 - y_{n+1}) \left( \frac{A^{n+1} - A}{A^{n+1} - 1} \right) \end{aligned}$$

hay:

$$\frac{y_{n+1} - y_l}{y_{n+1} - y_0} = \frac{A^{n+1} - A}{A^{n+1} - 1}$$

Mặt khác,

$y_{n+1} - y_l$  = sự thay đổi thành phần thực trong pha khí;

$y_{n+1} - y_0$  = sự thay đổi thành phần lớn nhất có thể trong pha khí.

Nếu  $y_l$ ,  $y_{s+1}$ ,  $x_s$ ,  $x_0$  là thành phần của chất bị hấp thụ ở thời điểm trước và sau khi hấp thụ ở pha lỏng và pha khí tương đối và  $y_0 = mx_0$  thì:

$$\frac{y_{n+1} - y_l}{y_{n+1} - mx_0} = \frac{\left(\frac{L_m}{mG_m}\right)^{s+1} - \left(\frac{L_m}{mG_m}\right)}{\left(\frac{L_m}{mG_m}\right)^{s+1} - 1} \quad (2.19)$$

## BÀI TẬP CHƯƠNG 2

### Bài 2.1

Người ta cần tách một hydrocacbon trong một loại dầu mỏ có chứa 2,55% mol hydrocacbon đó sao cho hàm lượng hydrocacbon giảm xuống còn 0,05% mol bằng phương pháp rửa bằng hơi nước để cứ 4 kmol hơi nước rửa được 100 kmol dầu.

Cân bằng lỏng-hơi của hydrocacbon trong dầu được mô tả bằng phương trình sau:

$$y_e = 33x$$

trong đó:  $y_e$  là phần mol trong pha hơi còn  $x$  là phần mol trong pha lỏng.

Hãy xác định số đĩa lý thuyết cần thiết cho yêu cầu tách nói trên. Giả thiết rằng dầu không bay hơi và nhiệt độ được giữ không đổi để hơi nước không bị ngưng tụ trong tháp rửa.

### Bài 2.2

Một hydrocacbon no có trọng lượng phân tử là 114 kg/kmol ở nhiệt độ 373K cần được tách khỏi hỗn hợp gồm hydrocacbon no đó với một hợp chất hữu cơ không bay hơi có trọng lượng phân tử là 135 kg/kmol bằng phương pháp sục với hơi nước. Hỗn hợp lỏng chứa 8% trọng lượng hydrocacbon no cần được tách ở nhiệt độ 373K để hàm lượng hydrocacbon no còn lại là 0,08%.

Nếu lượng hơi nước đưa vào gấp 3 lần lượng hơi nước tối thiểu thì cần bao nhiêu đĩa lý thuyết?

Biết rằng áp suất hơi của hydrocacbon no ở 373K là 53 kN/m<sup>2</sup>, quá trình tách được thực hiện ở áp suất thường, giả sử rằng quá trình tách tuân theo định luật Raoult.

### Bài 2.3

Hỗn hợp khí gồm NH<sub>3</sub> và không khí chứa 5% NH<sub>3</sub> được rửa bằng nước để nồng độ NH<sub>3</sub> giảm xuống còn 0,01%. Xác định số đĩa lý thuyết cần thiết

đáp ứng yêu cầu tách nói trên? Cho biết cường độ dòng nước:  $0,65 \text{ kg/m}^2.\text{s}$ , cường độ dòng khí  $0,40 \text{ kg/m}^2.\text{s}$  và phương trình đường cân bằng là  $Y = X$  trong đó  $X$  là tỉ số mol  $\text{NH}_3$  trong pha lỏng.

#### **Bài 2.4**

Khí của một nhà máy chứa 3%  $\text{CO}_2$  cần phải rửa để loại khí này dưới áp suất 25 atm sao cho hàm lượng  $\text{CO}_2$  giảm xuống 1%. Quá trình rửa khí được thực hiện ở  $25^\circ\text{C}$ . Độ tan của  $\text{CO}_2$  trong nước ở  $25^\circ\text{C}$ , áp suất 1 atm là:

$$\lambda = 0,746 \frac{\text{Ncm}^3\text{CO}_2}{\text{g.H}_2\text{O atm}}$$

Quá trình rửa khí tuân theo định luật Henry. Xác định tải trọng cực đại của nước cũng như lượng nước và số đĩa lý thuyết đối với tải trọng của nước bằng 90% tải trọng cực đại.

#### **Bài 2.5**

Cần phải rửa một loại khí đốt chứa 30% metan, 70 % nitơ bằng toluen dưới áp suất 60 atm ở  $25^\circ\text{C}$  sao cho hàm lượng metan của khí giảm xuống đến 1%. Độ tan của metan trong toluen ở  $25^\circ\text{C}$  là:

$$\lambda = 0,50 \frac{\text{Ncm}^3\text{CH}_4}{\text{g toluen atm}}$$

Quá trình rửa khí tuân theo định luật Henry. Độ tan của khí nitơ trong toluen được bỏ qua. Hãy xác định tải trọng cực đại của toluen cũng như lượng dung môi và số đĩa lý thuyết đối với tải trọng dung môi bằng 90% tải trọng cực đại.

#### **Bài 2.6**

Trong quá trình sản xuất axetylen bằng phương pháp hồ quang người ta thu được một hỗn hợp chứa 20% thể tích axetylen và 80% thể tích hydro. Cần phải rửa khí axetylen ra khỏi hỗn hợp này cho đến khi phần khí còn lại không chứa quá 0,2% thể tích axetylen. Dung môi được lựa chọn cho quá trình này là nước, axeton và dimetyl formamit. Hệ số Henry ở  $25^\circ\text{C}$  được trình bày ở bảng sau:



| Dung môi | Hệ số Henry H (atm) |
|----------|---------------------|
| Nước     | 1370                |
| Axeton   | 17,6                |
| DMF      | 9,6                 |

Quá trình rửa khí được thực hiện ở  $25^{\circ}\text{C}$  và dưới áp suất 1 atm.

Hãy xác định tải trọng cực đại với axetylen trong ba dung môi kể trên. Đối với tải trọng bằng 90% giá trị cực đại hãy xác định lượng dung môi cần thiết và số đĩa lý thuyết cần thiết.

### **Bài 2.7**

Phần lớn khí đốt khi khai thác bị bão hoà bằng hơi nước nên trước khi vận chuyển qua đường ống người ta phải hạ thấp hàm lượng nước đến giá trị ứng với áp suất hơi của băng ở  $-10^{\circ}\text{C}$ . Để tách nước trong khí đốt người ta dùng phương pháp rửa khí với dung môi là etylenglycol.

Khí đốt được khai thác ở  $30^{\circ}\text{C}$  cần được làm khô nhờ phương pháp rửa khí với dung môi etylenglycol ở cùng nhiệt độ như vậy cho đến khi điểm đông ở  $-10^{\circ}\text{C}$ . Áp suất hơi của nước ở các nhiệt độ khác nhau như sau:

$+30^{\circ}\text{C}$  là 31,8 mm Hg

$-10^{\circ}\text{C}$  là 1,9 mm Hg

Quá trình trên tuân theo định luật Henry.

$$p = Hx \quad \text{với} \quad H = 0,0324 \text{ atm}$$

- Hãy xác định tải trọng cực đại của etylenglycol đối với yêu cầu tách đề ra.
- Hãy xác định lượng dung môi cần thiết và số đĩa lý thuyết cho tải trọng bằng 50% giá trị tải trọng cực đại.

### **Bài 2.8**

Trong quá trình sản xuất etylenoxit dựa trên sự oxy hoá etylen bằng oxy của không khí nhờ xúc tác bạc ở  $250^{\circ}\text{C}$ , hình thành hỗn hợp với 3% thể tích etylenoxit. Etylenoxit được rửa ra khỏi hỗn hợp này bằng nước cho đến khi chỉ còn lại 0,1% thể tích. Sự hấp thụ của etylenoxit trong nước ở  $20^{\circ}\text{C}$  tuân theo định luật Henry:

$$p = Hx \quad \text{với} \quad H = 5,7 \text{ atm}$$

- Hãy xác định tải trọng cực đại của nước khi tiến hành quá trình rửa khí ở 20°C và áp suất 20 atm.
- Hãy xác định lượng dung môi và số bậc tách cần thiết khi tải trọng của dung môi bằng 80% giá trị cực đại.
- Cần phải đưa một lượng nước bao nhiêu trong 1 giờ vào cột rửa khí khi tháp rửa có năng suất 50.0<sup>3</sup> t/năm (một năm thiết bị vận hành 8000 giờ).

# CHƯƠNG 3

## PHƯƠNG PHÁP CHIẾT LỎNG-LỎNG

### 3.1. Giới thiệu chung

Một quá trình tách chất theo phương pháp chiết lỏng-lỏng cần tiến hành theo ba bước:

1. Cho dung môi chiết tiếp xúc với dung dịch chứa chất cần chiết.
2. Phân tách hai pha: dịch chiết (E - extract) và dịch bã (R - raffinate).
3. Tách và thu hồi dung môi chiết từ hai phần dịch bã và dịch chiết.

Một yếu tố rất quan trọng trong quá trình chiết lỏng-lỏng là việc lựa chọn dung môi cho yêu cầu chiết. Vì kỹ thuật tách chất bằng phương pháp chiết dựa trên đặc tính hòa tan khác nhau của các cấu tử trong các dung môi nên dung môi được chọn để chiết phải là dung môi chọn lọc, tức là nó có khả năng hòa tan chọn lọc một số cấu tử nào đó trong dung dịch cần chiết.

Quá trình chiết lỏng-lỏng có thể là một quá trình hóa học hay quá trình vật lý. Trong một số trường hợp chiết lỏng-lỏng, chất tan và dung môi chiết tương tác với nhau để tạo thành các hợp chất rất phức tạp và khi đó việc nghiên cứu động học của các quá trình trở nên rất quan trọng. Quá trình chiết này được Hanson phân loại như sau:

- a) Các quá trình chiết liên quan đến sự trao đổi cation, ví dụ như việc chiết các kim loại bằng axit cacboxylic.
- b) Các quá trình chiết liên quan đến sự trao đổi anion, ví dụ như việc chiết anion bằng các muối và các amin.

- c) Các quá trình chiết liên quan đến sự tạo thành sản phẩm phụ, ví dụ như việc chiết các hợp chất cơ photpho trung tính, quá trình tinh chế uran.

### 3.2. Các điều kiện cân bằng

Cân bằng phân bố của một chất tan trong hai pha lỏng được xác định từ định luật phân bố. Có nghĩa là, khi đạt tới cân bằng, tỉ lệ nồng độ của chất tan trong hai pha lỏng  $C_E/C_R = K'$ , trong đó  $K'$  là hằng số phân bố. Quan hệ này chỉ áp dụng đúng trong trường hợp dung môi sơ cấp và dung môi thứ cấp không trộn lẫn vào nhau (dung môi này không bị hòa tan vào dung môi kia và ngược lại.) Nếu chất tan ở dưới các dạng phân tử có trọng lượng phân tử khác nhau thì phải áp dụng định luật phân bố cho từng dạng. Trong trường hợp nồng độ của chất tan nhỏ thì định luật phân bố áp dụng đúng khi quá trình chiết không kèm theo phản ứng hóa học.

Việc thêm một dung môi mới vào một dung dịch có thể dẫn đến việc tạo thành một số loại hỗn hợp có các đặc điểm sau:

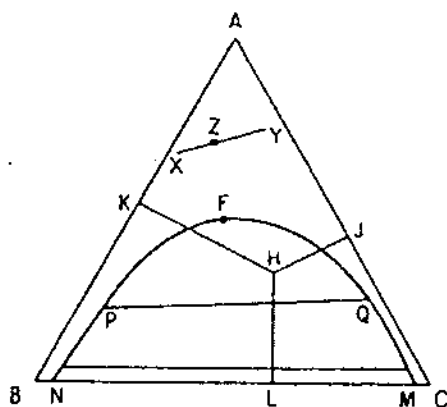
- Dung dịch đồng thể; trường hợp này dung môi lựa chọn là không phù hợp;
- Dung môi mới và dung môi ban đầu hoàn toàn không hòa tan vào nhau;
- Dung môi mới và dung môi ban đầu có thể hòa tan một phần vào nhau, trường hợp này dẫn đến sự tạo thành một cặp chất các chất lỏng hòa tan từng phần vào nhau;
- Tạo thành hai hay ba pha lỏng tan một phần vào nhau.

Trong các trường hợp này, các dung môi trong kiểu b,c và d là có thể sử dụng được. Tuy nhiên, kiểu dung môi trong các trường hợp b,c là khả quan nhất. Với kiểu dung môi trong trường hợp b, việc xác định cân bằng phân bố là qua đồ thị biểu diễn mối quan hệ giữa nồng độ chất tan trong dung môi sơ cấp và dung môi thứ cấp là khá đơn giản. Trong trường hợp c và d thì phải dùng giản đồ tam giác.

#### *Giản đồ tam giác*

Hệ gồm ba chất axeton (A), nước (B) và metyl isobutyl xeton (C) thuộc kiểu (c) (hình 3.1). Ở đây, A tan hoàn toàn trong B và C còn B và C hòa tan vào nhau từng phần. Như vậy, nếu như có một hỗn hợp được biểu diễn bằng

điểm H trong hình 3.1 thì hỗn hợp đó gồm 3 cấu tử A, B và C với tỷ lệ thành phần của ba cấu tử này tương ứng với tỷ lệ các đường hạ vuông góc HL, HJ, HK xuống các cạnh. Đoạn BN biểu diễn độ tan của C trong B và đoạn MC là độ tan của B trong C. Phần diện tích nằm dưới đường cong NPFQM (đường cong binodal) biểu diễn vùng dị thể và hỗn hợp nằm trong vùng này sẽ được tách thành hai pha. Các pha này có thành phần biểu diễn qua các điểm P và Q và PQ được gọi là dây cân bằng. Trên đường cong binodal tồn tại một điểm F mà tại điểm này hỗn hợp là một pha duy nhất nên không thể tách thành hai pha. Điểm F được gọi là điểm chiết tới hạn và điểm F này có thể xác định được bằng thực nghiệm. Điểm F có thành phần xác định ở từng nhiệt độ và áp suất xác định. Đối với các hỗn hợp có thành phần nằm dưới đường cong binodal, nhiệt độ và thành phần của một pha sẽ xác định thành phần của pha còn lại. Áp dụng quy tắc pha đối với hệ ba cấu tử trong điều kiện nhiệt độ và áp suất không đổi, số bậc tự do bằng số cấu tử trừ đi số pha. Trong vùng đồng thể chỉ có một pha lỏng sẽ có hai bậc tự do và khi đó sẽ cần xác định thành phần của hai cấu tử còn lại trong vùng dị thể, có hai pha, thì số bậc tự do chỉ còn lại là một.

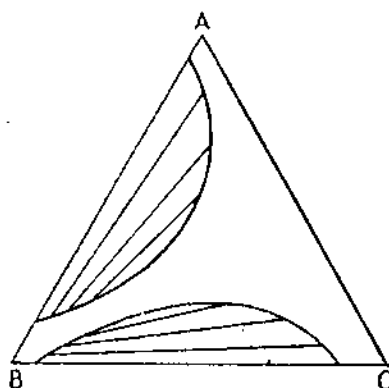


**Hình 3.1:** Cân bằng phân bố của axeton (A) trong nước (B) và trong metyl isobutyl xeton (C).

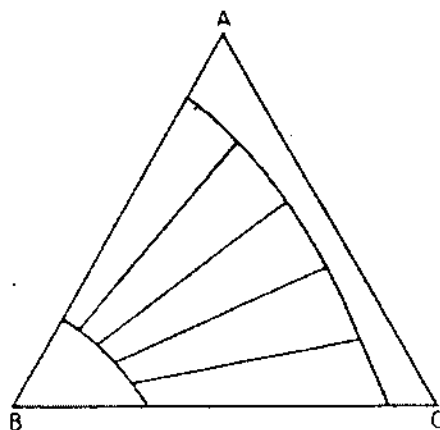
Một trong những đặc điểm rất hữu ích của phương pháp này là nếu như một dung dịch có thành phần X trộn với một dung dịch có thành phần Y thì kết quả của quá trình trộn này là sẽ cho một hỗn hợp được biểu diễn bằng điểm Z nằm trên đường XY và khi đó:

$$\frac{XZ}{ZY} = \frac{\text{Khối lượng của Y}}{\text{Khối lượng của X}}$$

Ngược lại, nếu nhấc Y ra khỏi hỗn hợp Z thì pha lỏng còn lại sẽ có thành phần là X.



**Hình 3.2:** Cân bằng phân bố của hệ 3 cấu tử anilin-nước-phenol.



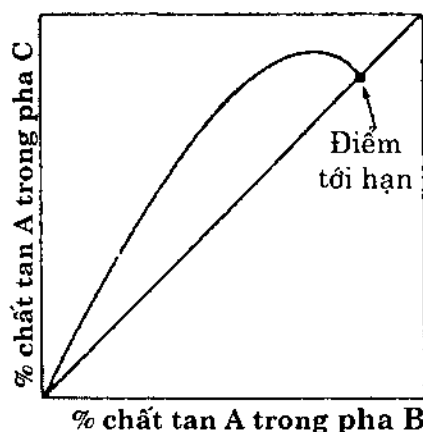
**Hình 3.3:** Cân bằng lỏng - hơi của hệ 3 cấu tử anilin-nước-phenol.

Trong hình 3.2 có hai vùng hỗn hợp dị thể còn trong hình 3.3 biểu diễn cho hệ ba cấu tử tạo thành một vùng dị thể. Trong hỗn hợp 3 cấu tử A (anilin), B (nước) và C (phenol) tạo thành một hỗn hợp theo kiểu hình 3.2. Tức là, cấu tử A và C tan hoàn toàn vào nhau trong khi các cấu tử A và B; B và C chỉ tan một phần vào nhau.

Các biểu đồ tam giác trên biểu diễn tỷ lệ các cấu tử trong hỗn hợp ở trạng thái cân bằng. Cách biểu diễn như trong hình 3.4 là một dạng biểu đồ rất hữu ích trong việc lựa chọn dung môi chọn lọc cho cấu tử quan tâm và số bậc chiết cần thiết để đạt được nồng độ dịch chiết như mong đợi. Trong biểu đồ 3.4 biểu diễn mối quan hệ giữa phần trăm của dung môi A trong pha B và phần trăm của dung môi A trong pha C ở điều kiện cân bằng. Nhân tố quan trọng nhất để xác định mức độ phù hợp của một dung môi là tỷ số nồng độ của cấu tử quan tâm trong hai pha chứ không hẳn là nồng độ thực của nó trong mỗi pha. Hệ số chọn lọc được xác định qua biểu thức sau:

$$\beta = \frac{\left[ \begin{array}{c} x_A \\ x_B \end{array} \right]_E}{\left[ \begin{array}{c} x_A \\ x_B \end{array} \right]_R} \quad (3.1)$$

trong đó,  $x_A$  và  $x_B$  là là khối lượng hay phân số mol của cấu tử A và B tương ứng trong pha E và R.



**Hình 3.4:** Cân bằng phân bố của chất tan A trong pha B và pha C.

Đối với một số hệ 3 cấu tử tan tương hỗ vào nhau, hệ số  $\beta$  có chiều hướng nhận một giá trị không đổi. Hệ số chọn lọc trong quá trình chiết lỏng-lỏng có ý nghĩa tương tự như độ bay hơi tương đối của các cấu tử trong quá trình chưng cất. Vì vậy, tính hiệu quả của việc tách chất dựa trên phương pháp chiết lỏng-lỏng phụ thuộc rất nhiều vào giá trị của hệ số chọn lọc  $\beta$ . Nếu

như giá trị của  $\beta$  tiến gần đến 1 thì số bậc chiết trở nên vô cùng lớn và chi phí của quá trình chiết là rất lớn. Trong trường hợp này quá trình chiết để tách chất không có giá trị thực tiễn và người ta phải lựa chọn các phương pháp khác cho việc tách chất. Khi  $\beta = 1$  thì quá trình chiết để tách chất là không thể thực hiện được.

### 3.3. Tính số bậc chiết cần thiết để đáp ứng một yêu cầu chiết

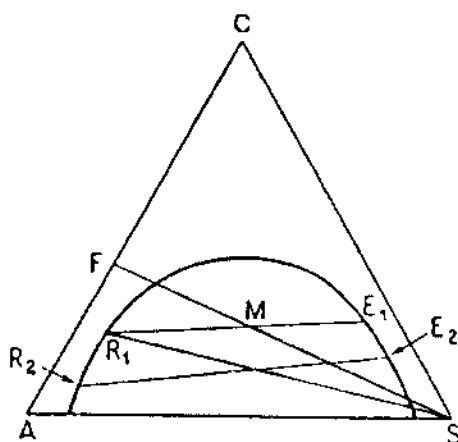
#### 3.3.1. Tính số bậc chiết trong hệ dung môi tan một phần vào nhau trong các hệ thống chiết xuôi dòng

Trong các trường hợp thông thường, khi các dung môi trong hệ hòa tan một phần vào nhau, hỗn hợp ban đầu F được cho tiếp xúc với dung môi chọn lọc S và tạo ra dịch chiết  $E_1$  và dịch bã  $R_1$ . Hệ được hình thành từ F và S được biểu diễn qua điểm M trong giản đồ tam giác, trong đó:

$$\frac{FM}{MS} = \frac{F}{S}$$

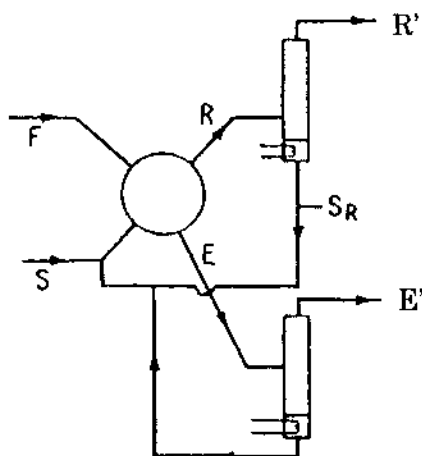
Hỗn hợp M sẽ tách pha và cho hai pha chính là dịch chiết  $E_1$  và dịch bã  $R_1$  ở hai giao điểm tương ứng của đường cân bằng và đường cong binodal.

Nếu quá trình chiết tiếp tục được thực hiện đến bậc hai, bằng cách thêm dung môi S vào dịch bã của bậc chiết thứ nhất  $R_1$  thì thu được dịch chiết  $E_2$  và dịch bã  $R_2$ .



**Hình 3.5:** Hệ thống chiết nhiều bậc với dung môi sạch ở mỗi bậc chiết.



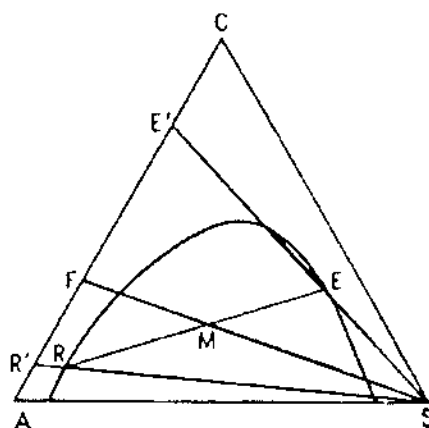


Hình 3.6: Chiết một bậc có thu hồi dung môi.

**\* Hệ số thu hồi dung môi**

Một quá trình tách chất hoàn chỉnh bao gồm thao tác chiết, thu hồi dung môi từ dịch bã và dịch chiết. Vì vậy, đối với các hệ thống chỉ có một bậc chiết giống như hệ thống được minh họa trong hình 3.6, dịch bã  $R$  được dẫn vào cột chưng cất và ở đó tách được dung môi  $S_R$  ra khỏi dịch bã, cho dịch bã  $R'$ ; dịch chiết  $E$  cũng được dẫn đến một cột chưng cất khác để tách ra dung môi  $S_E$  và dịch chiết mới  $E'$ . Các dòng dung môi  $S_R$  và  $S_E$  này sẽ được đưa trở lại hệ thống chiết lỏng-lỏng giống như trong hình vẽ 3.6. Quá trình này được thực hiện một cách tuần hoàn và được biểu diễn qua biểu đồ hình 3.7.

Nếu giả thiết rằng quá trình tách các dung môi trong các cột chưng cất này là hoàn toàn thì sau các quá trình này ta sẽ nhận được các dung môi  $S_R$  và  $S_E$  tinh khiết. Khi việc tách chất trong các cột chưng cất là không hoàn toàn thì người ta cũng vẫn dùng một giản đồ tương tự như giản đồ trên. Tuy nhiên, cần lưu ý rằng, khi  $ES$  làm thành một đường tiếp tuyến với đường cong binodal thì chúng ta sẽ nhận được nồng độ chất tan  $C$  trong dịch chiết  $E'$  là lớn nhất, và điều này cũng cho biết nồng độ tối đa của chất tan  $C$  trong hỗn hợp nguyên liệu ban đầu. Cần phải sử dụng một lượng dung môi chiết  $S$  đủ lớn để có thể hình thành một hỗn hợp  $M$  nằm trong vùng dị thể (dưới đường cong binodal).



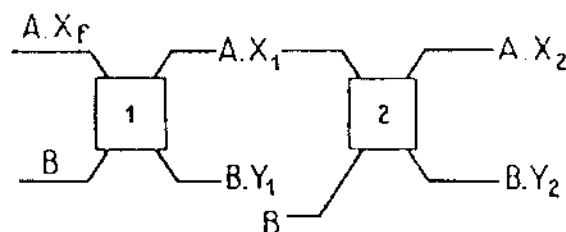
Hình 3.7: Quá trình chiết một bậc có thu hồi dung môi.

### 3.3.2. Tính số bậc chiết đối với hệ dung môi hoàn toàn không tan vào nhau trong các hệ thống chiết xuôi dòng

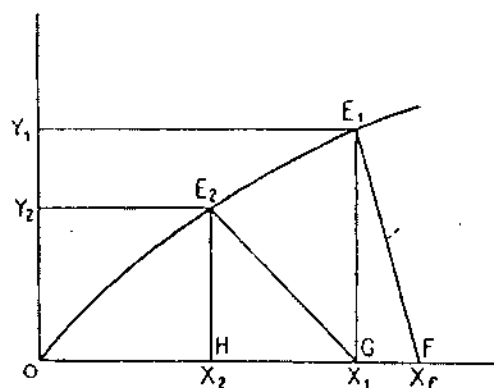
Trong trường hợp này để tính số bậc chiết ta không cần sử dụng đến giản đồ tam giác. Giả sử dung dịch ban đầu chứa A kg dung môi A và tỷ lệ khối lượng chất tan là  $X_r$ . Thêm vào hỗn hợp này B kg dung môi B. Sau khi các dung môi đã được trộn lẫn rồi tách pha thì ta sẽ nhận được dịch bã chứa dung môi A có tỷ lệ chất tan là  $X_1$  và dịch chiết có dung môi B có tỷ lệ khối lượng chất tan là  $Y_1$ . Phương trình cân bằng vật chất theo chất tan như sau:

$$\begin{aligned} AX_r &= AX_1 + BY_1 \\ \Rightarrow \frac{Y_1}{X_1 - X_r} &= -\frac{A}{B} \end{aligned} \quad (3.2)$$

Từ điểm F biểu diễn cho dung dịch đưa vào vẽ một đường thẳng có độ dốc  $(-A/B)$  và cắt đường cong cân bằng tại điểm  $E_1$ . Từ đó suy ra thành phần của chất tan trong dịch chiết là  $Y_1$  và thành phần chất tan trong dịch bã là  $X_1$ . Nếu dung môi B tiếp tục được thêm vào để quá trình chiết được tiếp tục thì sau bậc chiết này sẽ nhận được điểm  $E_2$ .  $E_2$  có thể được xác định trên đường cân bằng khi vẽ  $GE_2$  có độ dốc  $(-A/B)_2$ . Tại điểm  $E_2$  sẽ nhận được thành phần dịch chiết và dịch bã tương ứng là  $X_2$  và  $Y_2$ . Cứ tiếp tục như vậy đối với các bậc chiết tiếp theo đó và tỷ lệ dung môi B ở dịch bã sẽ thay đổi theo các bậc chiết.



Hình 3.8: Hệ thống chiết xuôi dòng.



Hình 3.9: Phương pháp đồ thị xác định số bậc chiết trong các hệ dung môi hoàn toàn không hòa tan vào nhau trong các hệ thống chiết xuôi dòng.

**\* Các điều kiện áp dụng được định luật phân bố**

Nếu như định luật phân bố được nghiệm đúng thì đường cong cân bằng trở thành đường thẳng có phương trình  $Y = mX$ . Cân bằng vật chất đối với chất tan như sau:

$$AX_F = AX_1 + BY_1 = AX_1 + BmX_1 = (A + Bm)X_1$$

$$X_1 = \left[ \frac{A}{A + Bm} \right] X_F \quad (3.3)$$

Khi thêm B kg dung môi B cho bậc chiết tiếp theo (bậc chiết thứ hai) cho dịch chiết có nồng độ  $Y_2$  và dịch bã có nồng độ  $X_2$ . Tức là:

$$\begin{aligned}
 AX_1 &= AX_2 + BmX_2 = X_2(A + Bm) \\
 X_2 &= \left[ \frac{A}{A + Bm} \right] X_1 = \left[ \frac{A}{A + Bm} \right]^2 X_r
 \end{aligned}
 \tag{3.4}$$

Một cách tương tự, đối với bậc chiết thứ n:

$$X_n = \left[ \frac{A}{A + Bm} \right]^n X_r \tag{3.5}$$

Như vậy, số bậc chiết cần thiết sẽ là:

$$n = \frac{\log \frac{X_n}{X_r}}{\log \left[ \frac{A}{A + Bm} \right]} \tag{3.6}$$

### 3.3.3. Tính số bậc chiết đối với hệ dung môi hoàn toàn không tan vào nhau trong các hệ thống chiết ngược dòng

Trong các hệ thống chiết ngược dòng, sau khi dung dịch F do chất B tan trong dung môi A được chiết ở bậc thứ nhất sẽ cho dịch bã  $R_2$ . Dòng dịch bã này tiếp tục được tiến hành chiết đến bậc chiết thứ n và cho dịch bã  $R_n$ . Trong khi đó dung môi sạch S được dẫn ngược từ đĩa thứ n và cho dịch chiết  $E_1$  sau khi ra khỏi đĩa đầu tiên.

Gọi X là tỷ lệ chất tan đối với dung môi trong dịch bã còn Y là tỷ lệ của chất tan đối với dung môi trong dịch chiết. Vì hai dung môi là hoàn toàn không hoà tan vào nhau nên dòng dịch bã là A còn dòng dung môi thêm vào dịch chiết là S. Do đó, cân bằng vật chất viết cho chất tan như sau.

✓ Đối với bậc chiết thứ nhất:

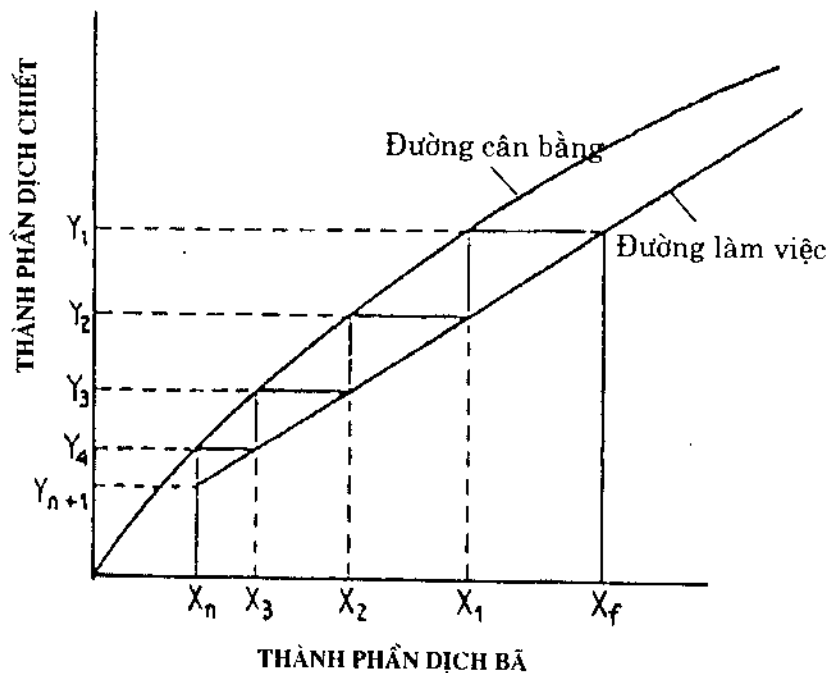
$$AX_r + SY_2 = AX_1 + SY_1$$

✓ Đối với bậc chiết thứ n:  $AX_{n-1} + SY_{n+1} = AX_n + SY_n$

✓ Đối với toàn bộ hệ thống chiết:

$$\begin{aligned}
 AX_r + SY_{n+1} &= AX_n + SY_1 \\
 Y_{n+1} &= \frac{A}{S} (X_n - X_r) + Y_1
 \end{aligned}
 \tag{3.7}$$

Phương trình trên là phương trình tuyến tính, độ dốc của đường thẳng được biểu diễn qua phương trình này có độ dốc  $A/S$  và phương trình này còn được gọi là phương trình đường làm việc. Từ cân bằng trên ta thấy ngay rằng đường thẳng này đi qua hai điểm có tọa độ  $(X_r, Y_r)$  và  $(X_n, Y_{n+1})$ . Trong hình 3.10 biểu diễn đường cong cân bằng ( $Y_n$  qua  $X_n$ ) và đường làm việc. Số bậc chiết cần thiết để nâng thành phần dịch chiết từ  $X_r$  đến  $X_n$  được tìm bằng cách vẽ các đường bậc thang giữa đường cong cân bằng và đường làm việc. Trong hình 3.10 minh họa một quá trình chiết mà với 4 bậc chiết để đáp ứng yêu cầu chiết đã đặt ra. Cần phải lưu ý rằng đường làm việc được kết hợp từ thành phần của của dịch bã rời đi và dung môi sạch đi vào đĩa chiết đó.

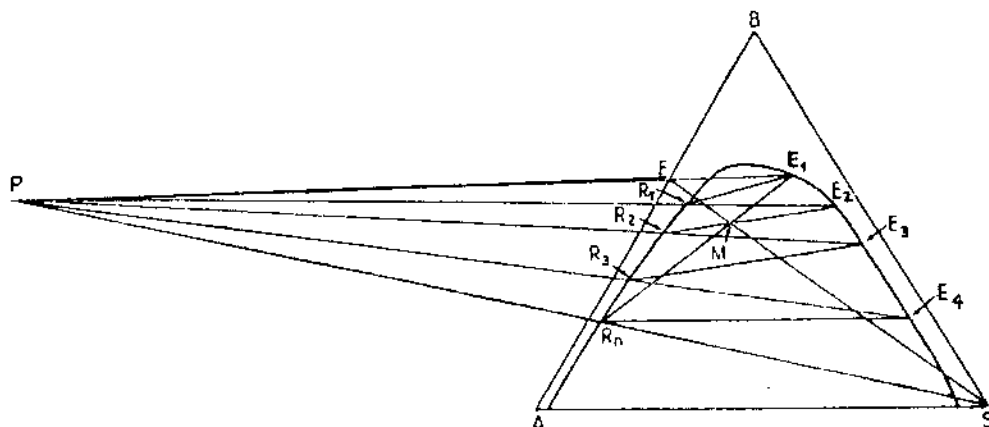


**Hình 3.10:** Phương pháp đồ thị xác định số bậc chiết trong hệ chiết ngược dòng đối với các dung môi hoàn toàn không hòa tan vào nhau.

### 3.3.4. Tính số bậc chiết đối với hệ các dung môi tan vào nhau một phần trong các hệ thống chiết ngược dòng

Hệ thống chiết ngược dòng đối với hệ các dung môi hòa tan một phần vào nhau tương tự như trong trường hợp hệ các dung môi hoàn toàn không

hòa tan vào nhau. Tuy nhiên, trong trường hợp này lượng dung môi trong dịch chiết và dịch bã thay đổi theo các bậc chiết. Phương trình cân bằng vật chất được viết cho toàn bộ dòng dịch bã rời đi và toàn bộ dòng dịch chiết đi vào đĩa chiết đó.



**Hình 3.11:** Phương pháp xác định số bậc chiết trong hệ chiết ngược dòng đối với hệ dung môi hòa tan vào nhau một phần.

Như trong hình 3.11, một dung dịch  $F$  được đưa vào chiết để cho dịch chiết  $E_1$ , dung môi sạch  $S$  ( $=$  dòng dịch chiết  $E_{n+1}$ ) và dịch bã  $R_n$ . Cân bằng vật chất viết cho chất tan như sau:

✓ Đối với bậc chiết thứ nhất:

$$\begin{aligned} F + E_2 &= R_1 + E_1 \\ F - E_1 &= R_1 - E_2 \end{aligned} \quad (3.8)$$

✓ Đối với toàn bộ bậc chiết từ 1 đến  $n$ :

$$\begin{aligned} F + E_{n+1} &= R_{n+1} + E_1 \\ F - E_1 &= R_n - E_{n+1} \end{aligned} \quad (3.9)$$

✓ Đối với bậc chiết thứ  $n$ :

$$\begin{aligned} R_{n-1} + E_{n+1} &= R_n + E_n \\ R_{n-1} - E_n &= R_n - E_{n+1} \end{aligned} \quad (3.10)$$

Như vậy, sự chênh lệch giữa dịch bã đi ra và dịch chiết đi vào ở các bậc chiết luôn là một số không đổi. Một cách tương tự, nếu ta biểu diễn về hàm lượng của các cấu tử trong dịch bã và trong dịch chiết trong các bậc chiết cũng là một số không đổi. Điều này có nghĩa là đối với cách biểu diễn trong giản đồ tam giác thì các đường nối hai điểm được biểu diễn bằng  $R_n$  và  $E_{n+1}$  sẽ đi qua một đỉnh chung. Số bậc chiết cần thiết để nồng độ giảm từ nồng độ ban đầu  $F$  xuống đến nồng độ dịch bã  $R_n$  có thể tính theo phương pháp hình vẽ trên giản đồ tam giác như trên hình 3.11.

Điểm giao nhau giữa điểm  $F$  và  $S$  biểu diễn thành phần của nguyên liệu và dung môi  $S$ . Như vậy, thành phần của hỗn hợp  $F$  và  $S$  được biểu diễn qua điểm  $M$ , trong đó:

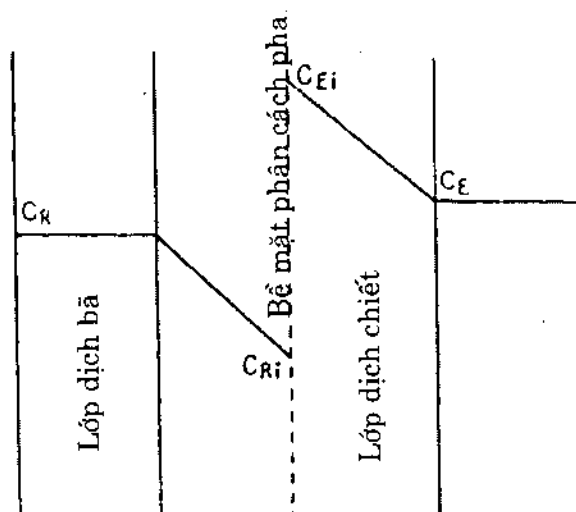
$$\frac{MS}{MF} = \frac{\text{khối lượng của } F}{\text{khối lượng của } S}$$

Vẽ một đường thẳng từ  $R_n$  qua  $M$  và cắt đường cong binodal tại điểm  $E_1$ . Nối hai đường thẳng từ các điểm  $E_1$  với  $F$  và  $S$  với  $R_n$  rồi kéo dài chúng sẽ cắt nhau tại đỉnh  $P$ . Cần lưu ý rằng điểm  $P$  biểu diễn một hỗn hợp tương đương.

Vậy, trong một bậc chiết lý tưởng, dịch chiết  $E_1$  đi ra nằm cân bằng với dịch bã  $R_1$ , như vậy điểm  $R_1$  là điểm cuối của đường connot bắt nguồn từ điểm  $E_1$ . Để tìm dịch chiết  $E_2$  ta vẽ đường  $PR_1$ , đường này cắt đường binodal tại điểm  $E_2$ . Các điểm  $R_2, E_3, R_3, E_4, \dots$  có thể được xác định theo cách tương tự như trên. Nếu đường connot cuối cùng (giả sử  $ER_4$ ) không đi qua  $R_4$  thì lượng dung môi thêm vào hỗn hợp là không đúng và không tạo sự thay đổi cần thiết về thành phần. Do đó điều này không làm ảnh hưởng nhiều đến phương pháp vì nó vẫn cho ta biết số đĩa lý thuyết cần thiết để đáp ứng yêu cầu tách đề ra là đủ chính xác.

#### **\* Quá trình chiết liên tục trong cột**

Trong phương pháp này người ta sử dụng các tháp kiểu phun có khả năng chiết ngược dòng liên tục theo cách tương tự như trong phương pháp hấp thụ khí hay phương pháp chưng cất. Áp dụng lý thuyết khuếch tán hai lớp, gradient nồng độ trong quá trình chuyển chất đối với một chất tan nào đó từ pha dịch bã vào pha dịch chiết được biểu diễn trong hình 3.12, tương tự như trong phương pháp hấp thụ khí.



**Hình 3.12:** Sự biến thiên nồng độ theo phương thẳng đứng ở vùng sát bề mặt phân cách pha.

Quá trình chuyển chất sang lớp dịch chiết qua bề mặt phân cách pha có sự chênh lệch nồng độ hai phía là  $C_R - C_{Ri}$  và qua lớp dịch chiết có sự chênh lệch nồng độ là  $C_{Ei} - C_E$ .

Tốc độ chuyển chất qua hai lớp này có thể được biểu diễn, tương tự như đối với quá trình hấp thụ, qua phương trình sau:

$$N' = k_R (C_R - C_{Ri}) = k_E (C_{Ei} - C_E) \quad (3.12)$$

trong đó:  $C_R$ ,  $C_E$  là nồng độ chất tan trong dịch bã và dịch chiết theo đơn vị mol/đơn vị thể tích.  $k_R$ ,  $k_E$  là hệ số chuyển chất qua các lớp dịch bã và dịch chiết còn  $N'$  là tốc độ chuyển chất tính theo mol trên một đơn vị diện tích.

Như vậy,

$$\frac{k_R}{k_E} = \frac{C_{Ei} - C_E}{C_R - C_{Ri}} = \frac{\Delta C_E}{\Delta C_R} \quad (3.13)$$

Nếu như đường cân bằng là đường thẳng thì quan hệ cân bằng ở bề mặt phân cách pha có dạng:

$$C_{Ei} = mC_{Ri} \quad (3.14)$$

Suy ra:



$$C_E = mC_R^* \quad (3.15)$$

và

$$C_E^* = mC_R \quad (3.16)$$

trong đó :  $C_E^*$  là nồng độ của pha E nằm cân bằng với nồng độ  $C_R$  trong pha R, còn  $C_R^*$  là nồng độ của pha R nằm cân bằng với pha E có nồng độ  $C_E$ .

Quá trình chuyển chất có thể biểu diễn qua hệ số chuyển chất tổng  $K_R$  và  $K_E$  như sau:

$$N' = K_R (C_R - C_R^*) = K_E (C_E^* - C_E) \quad (3.17)$$

và cũng tương tự như quá trình hấp thụ:

$$\frac{1}{K_E} = \frac{1}{k_R} + \frac{m}{mk_E} \quad (3.18)$$

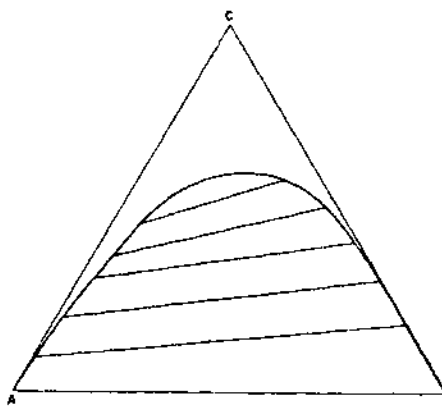
và

$$\frac{1}{K_E} = \frac{1}{k_E} + \frac{m}{k_R} \quad (3.19)$$

### Ví dụ

Người ta cần chiết cấu tử C từ hỗn hợp gồm hai cấu tử A và C chứa 50% C bằng một dung môi thứ cấp B. Trọng lượng của dung môi thứ cấp đưa vào bằng 25% trọng lượng của hỗn hợp đầu.

Giản đồ tam giác cân bằng pha cho hệ ba cấu tử được cho ở hình 3.13.



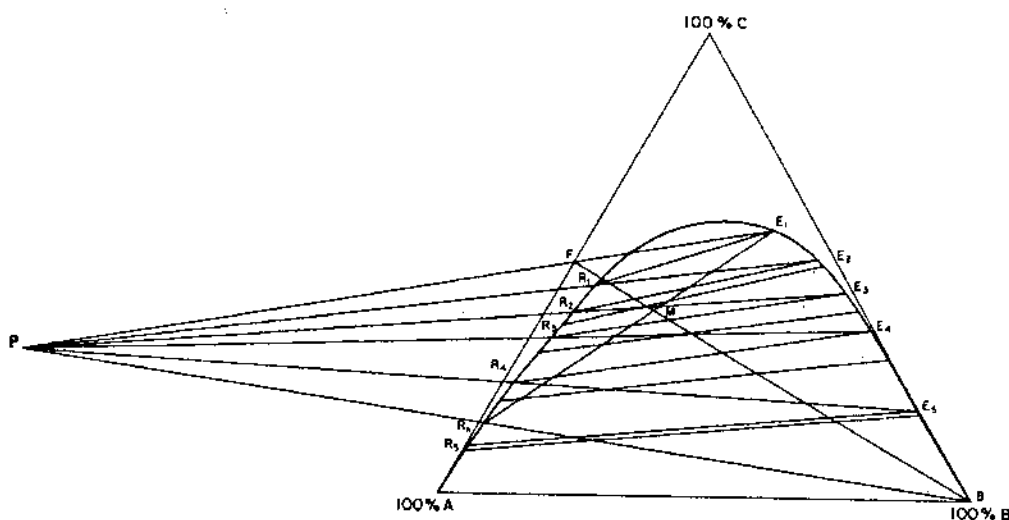
**Hình 3.13:** Giản đồ tam giác hệ 3 cấu tử A-B-C.

Hãy xác định số bậc chiết cần thiết cho yêu cầu tách nói trên và nồng độ chiết ở bậc chiết thứ nhất, biết rằng dịch bã chứa 15% cấu tử C.

### Lời giải

Từ giản đồ tam giác cân bằng pha cho hệ A-C-B đã cho, đánh dấu các điểm F và M tương ứng với các dữ kiện của đề bài. F là trung điểm của đoạn thẳng AC, tại đó thành phần của cấu tử A và cấu tử C đều bằng 0,5. Nối F và B, điểm trộn lẫn M thỏa mãn điều kiện của đề bài  $FM / MB = 0,25$ .

$R_n$  được xác định trên đường binodal, tại đó thành phần của cấu tử C là 0,15 (thành phần của B và A cũng xác định được là 0,01 và 0,84).



**Hình 3.14:** Giản đồ tam giác xác định số đĩa lý thuyết.

Đường thẳng  $R_n M$  cắt đường binodal tại  $E_1$ , giao điểm của  $E_1 F$  và  $R_n B$  là điểm tập hợp P. Điểm  $R_1$  được xác định dựa vào đường liên hợp. Đường thẳng  $PR_1$  cắt đường binodal tại  $E_2$  và cứ tiến hành tương tự như trên, người ta thấy điểm  $R_5$  thấp hơn so với điểm  $R_n$  do đó số bậc chiết cần thiết là 5.

Dựa vào giản đồ hình 3.14, nồng độ chiết ở bậc chiết thứ nhất  $E_1$  là 9%A, 58%C, và 33%B.

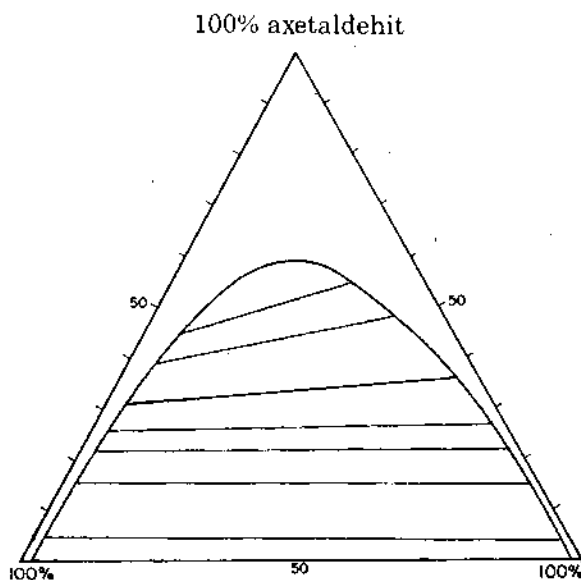
### BÀI TẬP CHƯƠNG 3

#### Bài 3.1

Người ta cần chiết axetaldehit từ dung dịch nước chứa 50% khối lượng axetaldehit bằng dung môi thứ cấp S ở 293 K theo phương pháp ngược dòng sao cho hàm lượng axetaldehit giảm xuống còn 5%. Tốc độ dòng của hỗn hợp dầu là 0,025 kg/s, lượng dung môi thứ cấp đưa vào tương đương với khối lượng hỗn hợp dầu vào.

Hãy xác định số bậc tách cần thiết cho yêu cầu tách nói trên; xác định khối lượng và nồng độ của các cấu tử trong bậc chiết thứ nhất.

Giản đồ tam giác cân bằng pha của hệ ở 293K được cho trong hình 3.15



**Hình 3.15:** Giản đồ tam giác xác định số đĩa lý thuyết.

**Bài 3.2**

Dung môi thứ cấp S được đưa vào với tốc độ  $160 \text{ cm}^3/\text{s}$  để chiết cấu tử A trong hỗn hợp đầu chứa 10% về trọng lượng của cấu tử đó trong dung môi B theo phương pháp ngược dòng. Tốc độ của hỗn hợp đầu ở lối vào là  $400 \text{ cm}^3/\text{s}$ . Xác định thành phần của dịch bã. Nếu vẫn sử dụng lượng dung môi thứ cấp như trên được phân đều cho ba bậc tách, nhưng thực hiện chiết theo phương pháp cùng chiều thì nồng độ của dịch bã là bao nhiêu?

Dữ liệu cân bằng phân bố của cấu tử A trong dung môi sơ cấp B và thứ cấp S cho trong bảng sau:

|            |                 |                 |                               |
|------------|-----------------|-----------------|-------------------------------|
| kg A/ kg B | 0,05            | 0,10            | 0,15                          |
| kg A/ kg S | 0,069           | 0,159           | 0,258                         |
| Tỷ trọng   | $\rho_A = 1200$ | $\rho_B = 1000$ | $\rho_S = 800 \text{ kg/m}^3$ |

**Bài 3.3**

Trong quá trình tách phenol ra khỏi nước thải sử dụng thiết bị chiết ngược dòng, người ta dùng di-izopropyl ete làm dung môi thứ cấp. Sự phân bố của phenol giữa nước và di-izopropyl tại  $25^\circ\text{C}$  tuân theo phương trình Nernst:  $Y = 20 X$

Hãy xác định nồng độ dịch chiết và số bậc chiết cần thiết để đáp ứng yêu cầu tách đã cho. Cho biết:

- Tải trọng của nguyên liệu đầu  $x_F = 10 \text{ g/kg}$  nước và của dịch bã  $x_R = 0,08 \text{ g/kg}$  nước.
- Tỷ số dung môi P/S = 10 kg/kg.
- Nồng độ của phenol trong dung môi thứ cấp là  $y_L = 0,05 \text{ g/kg}$ .

**Bài 3.4**

Từ nước thải có hàm lượng phenol  $15 \text{ g/kg}$  cần phải chiết phenol cho đến khi hàm lượng phenol còn lại trong đó không quá  $0,05 \text{ g/kg}$ . Dùng *n*-butyl axetat làm dung môi chiết ( $K=56$ ).

- Hãy xác định nồng độ chiết cực đại cũng như tỷ lệ dung môi cực đại.

- Cần phải lấy tỷ lệ dung môi và số đĩa lý thuyết là bao nhiêu khi nồng độ của dịch chiết được bằng 60% nồng độ chiết cực đại.

### **Bài 3.5**

Trong nước thải của nhà máy tổng hợp axit salixylic còn chứa 0,2% khối lượng axit này. Cần phải chiết chúng cho đến khi nồng độ của axit salixylic còn lại trong nước thải là 0,025% khối lượng. Dung môi chiết được sử dụng (dung môi thứ cấp) là benzen và dietylete. Axit salixylic phân bố giữa nước và dietylete tương ứng với định luật phân bố Nernst với hệ số phân bố  $K=127$  (ở  $25^{\circ}\text{C}$ ). Sự phân bố của axit salixylic trong benzen và nước không tuân theo định luật phân bố Nernst.

Biết rằng khối lượng riêng của các dung môi ở  $25^{\circ}\text{C}$  (kg/l) là:  $d_{\text{nước}} = 1$ ;  $d_{\text{dietylete}} = 0,71$ ;  $d_{\text{benzen}} = 0,87$ .

- Hãy tính nồng độ chiết cực đại với dung môi thứ cấp của cả hai trường hợp.
- Hãy xác định tỷ lệ dung môi và số đĩa lý thuyết tương ứng cho nồng độ chiết bằng 60% nồng độ chiết cực đại.
- Hãy xác định lượng dung môi cần thiết cho một thiết bị chiết với lượng nước thải liên tục cho qua là  $3 \text{ m}^3/\text{giờ}$ .

Sự phân bố của axit salixylic trong nước và benzen ở  $25^{\circ}\text{C}$  được cho trong bảng sau:

| Axit salixylic trong nước (mol/l) | Axit salixylic trong benzen (mol/l) |
|-----------------------------------|-------------------------------------|
| 0,00260                           | 0,00440                             |
| 0,00373                           | 0,00634                             |
| 0,00503                           | 0,01149                             |
| 0,00930                           | 0,03904                             |
| 0,01187                           | 0,04079                             |
| 0,01460                           | 0,06150                             |
| 0,01635                           | 0,2220                              |

**Bài 3.6**

Người ta cần thu hồi lại nguyên liệu A từ dung dịch nước thải của một nhà máy bằng cách rửa với một dung môi thứ cấp S. Hỗn hợp khi đó tách thành hai pha, pha hữu cơ chứa A và dung môi S và pha nước chứa A và nước.

Hãy chứng tỏ rằng, tốc độ dung môi đạt hiệu quả kinh tế cao nhất  $W$  (kg/s) được tính bằng biểu thức:

$$W = [(F^2 a x_0) / mb]^{0.5} - F/m$$

trong đó: tốc độ của hỗn hợp đầu là  $F$  kg/s, hỗn hợp đầu chứa  $x_0$  kg A/ kg nước.

Cho biết giá thành của nguyên liệu A trong pha dung môi =  $Ea$ /kg A, giá dung môi =  $Eb$ /kg S và dữ liệu cân bằng được cho bởi biểu thức:

$$(kg\ A / kg\ S)_{pha\ hữu\ cơ} = m (kg\ A / kg\ nước)_{pha\ nước} \quad \text{và } a, b, m \text{ là các hằng số}$$

**Bài 3.7**

Trong quá trình chế biến cốc bằng hơi nước, pyridin còn lại trong dung dịch loãng, chúng có thể được chiết bằng benzen. Cân bằng lỏng-lỏng của nước và benzen ở  $25^\circ C$  được cho trong bảng sau:

|                              |       |       |       |
|------------------------------|-------|-------|-------|
| x (phân số mol trong nước)   | 0,012 | 0,031 | 0,074 |
| y (phân số mol trong benzen) | 0,135 | 0,254 | 0,317 |

- Hãy xác định nồng độ dịch chiết cực đại để chiết được 5% trọng lượng pyridin của dịch chiết nước.
- Hãy xác định tỷ lệ dung môi và số đĩa lý thuyết đối với trường hợp nồng độ dịch chiết bằng 70% nồng độ dịch chiết cực đại và nồng độ của dịch bã bằng 0,05% trọng lượng.

**Bài 3.8**

Hỗn hợp hai cấu tử dioxan/nước không thể tách được bằng phương pháp chưng cất thông thường vì chúng tạo thành hỗn hợp đẳng phí. Để giải quyết vấn đề này người ta sử dụng phương pháp chiết dioxan từ dung dịch nước bằng benzen.

Một dung dịch chứa 20% dioxan trong nước được chiết ngược dòng liên tục với benzen tinh khiết sao cho dịch bã chỉ còn chứa 2% dioxan.

- Hãy xác định tỷ lệ dung môi cực đại.
- Hãy tính số đĩa lý thuyết cần thiết đối với tỷ lệ dung môi bằng 80% tỷ lệ dung môi cực đại.
- Nồng độ chiết sẽ là bao nhiêu dưới những điều kiện này.

Các dữ kiện cân bằng cho sự phân bố của dioxan giữa nước và benzen ở 25°C.

|                                   |     |      |      |
|-----------------------------------|-----|------|------|
| % trọng lượng dioxan trong nước   | 5,1 | 18,9 | 25,2 |
| % trọng lượng dioxan trong benzen | 5,2 | 22,5 | 32,0 |

### **Bài 3.9**

Dựng giản đồ tam giác cân bằng pha cho hệ nước - axeton - clobenzen theo các số liệu cho ở bảng sau. Xác định theo giản đồ:

- a) Hàm lượng nước và clobenzen trong lớp nước với nồng độ axeton 45% trọng lượng.
- b) Thành phần lớp clobenzen cân bằng với nó.

| Thành phần các pha cùng tồn tại (%) |        |           |            |        |           |
|-------------------------------------|--------|-----------|------------|--------|-----------|
| Pha nước                            |        |           | Pha hữu cơ |        |           |
| Nước                                | Axeton | Clobenzen | Nước       | Axeton | Clobenzen |
| 99,89                               | 0      | 0,11      | 0,18       | 0      | 99,82     |
| 89,79                               | 10     | 0,21      | 0,49       | 10,79  | 88,72     |
| 79,89                               | 20     | 0,31      | 0,79       | 22,23  | 76,98     |
| 69,42                               | 30     | 0,58      | 1,72       | 37,48  | 60,80     |
| 58,84                               | 40     | 1,36      | 3,05       | 49,44  | 47,51     |
| 46,28                               | 50     | 3,72      | 7,24       | 59,19  | 33,57     |
| 24,41                               | 60     | 12,59     | 22,85      | 61,07  | 15,08     |
| 25,66                               | 60,58  | 13,76     | 25,66      | 60,58  | 13,76     |

**Bài 3.10**

Cho biết các dữ liệu về cân bằng pha như sau:

| Pha nước         |                           | Pha hữu cơ       |                           |
|------------------|---------------------------|------------------|---------------------------|
| Benzen,<br>% mol | <i>t</i> – BuOH,<br>% mol | Benzen,<br>% mol | <i>t</i> – BuOH,<br>% mol |
| 0,04             | 0,4                       | 98,8             | 0,7                       |
| 0,05             | 1,2                       | 96,8             | 2,3                       |
| 0,07             | 2,5                       | 91,5             | 7,0                       |
| 0,08             | 3,6                       | 76,9             | 18,0                      |
| 0,1              | 4,2                       | 58,7             | 28,6                      |
| 0,11             | 4,6                       | 43,4             | 35,0                      |
| 0,12             | 4,9                       | 30,9             | 37,9                      |
| 0,13             | 5,3                       | 19,8             | 38,0                      |
| 0,17             | 6,2                       | 10,5             | 33,9                      |
| 0,31             | 7,7                       | 5,5              | 27,4                      |
| 0,49             | 9,1                       | 3,8              | 23,3                      |
| 1,5              | 14,6                      | 1,50             | 14,6                      |

Trong quá trình thủy phân iso-buten người ta thu được sản phẩm *tert*-butanol. Hỗn hợp nước và *tert*-butanol không thể tách bằng phương pháp chưng cất vì nước tạo thành hỗn hợp đẳng phí với *tert*-butanol, do đó người ta phải thực hiện quy trình chiết *tert*-butanol bằng dung môi benzen. Biết rằng *tert*-butanol không tạo thành hỗn hợp đẳng phí với benzen.

Dung dịch chứa 15% *tert*-butanol trong nước cần được chiết trong một thiết bị chiết ngược dòng liên tục bằng benzen sao cho nồng độ *tert*-butanol giảm xuống còn 1%.

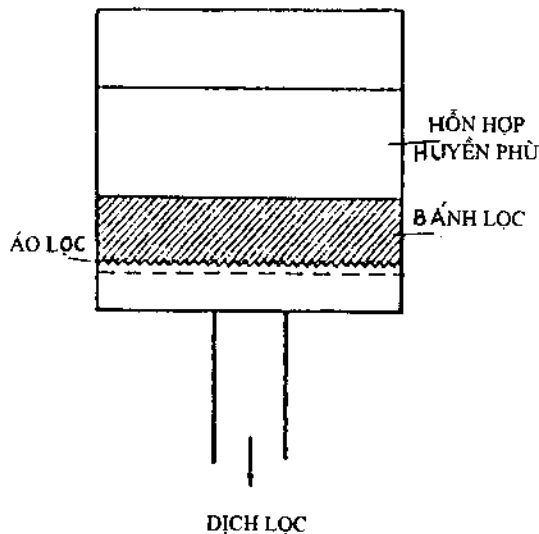
- Xác định lượng dung môi cần thiết tối thiểu và nồng độ dịch chiết tối đa.
- Xác định lượng dung môi và số bậc chiết cần thiết sao cho nồng độ dịch chiết đạt 90% nồng độ dịch chiết cực đại.



## CHƯƠNG 4

### TÁCH CHẤT BẰNG PHƯƠNG PHÁP LỌC

Việc tách các tiểu phân rắn ra khỏi dung dịch huyền phù bằng cách cho dung dịch huyền phù đi qua một lớp vật liệu xốp có khả năng giữ các tiểu phân rắn lại còn cho chất lỏng đi qua được gọi là quá trình lọc.



Hình 4.1: Sơ đồ nguyên tắc quá trình lọc.

#### 4.1. Lý thuyết của quá trình lọc

Trong quá trình lọc, các tiểu phân chất rắn được giữ lại bên trên lớp vật liệu lọc sẽ tạo thành bánh lọc và ngày càng dày lên làm cho tốc độ chất lỏng đi qua bánh lọc và vật liệu lọc khó khăn hơn và nếu như áp suất lọc được giữ không

đổi thì tốc độ của quá trình lọc sẽ bị giảm dần. Tuy nhiên, nếu ta tăng áp suất đủ để bù đắp sự cản trở do việc tăng độ dày của bánh lọc gây nên thì tốc độ của quá trình lọc có thể được giữ không đổi.

Như vậy, sẽ có hai cách vận hành khác nhau một thiết bị lọc: quá trình lọc được vận hành áp suất lọc không thay đổi và quá trình lọc được vận hành ở tốc độ lọc không thay đổi.

Vì các hạt tạo thành bánh lọc là rất nhỏ và dòng chất lỏng đi qua lớp vật liệu lọc là rất chậm nên đối với một khoảng thời gian rất nhỏ thì:

$$u = \frac{1}{A} \frac{dV}{dt} = \frac{e^3}{5(1-e)^2 S^2} \times \frac{-\Delta P}{\mu l} \quad (4.1)$$

trong đó:

$V$  là thể tích của dịch lọc đi qua trong thời gian  $t$ ;

$A$  là diện tích của bánh lọc;

$u$  là tốc độ lọc ;

$l$  là độ dày của bánh lọc;

$S$  là bề mặt đặc trưng của các tiểu phân;

$e$  là độ rỗng;

$\mu$  là độ nhớt của dịch lọc;

$\Delta P$  là hiệu số chênh lệch của áp suất lọc.

Các giai đoạn đầu của quá trình lọc có ý nghĩa quan trọng vì các lý do sau đây:

- Đối với quá trình lọc ở áp suất không đổi thì tốc độ của quá trình lọc sẽ lớn nhất khi bắt đầu lọc vì lúc đó độ cản trở của bánh lọc là nhỏ nhất.
- Sự hình thành các lớp tiểu phân rắn đầu tiên trên vật liệu lọc sẽ ảnh hưởng đến cấu trúc của toàn bộ bánh lọc

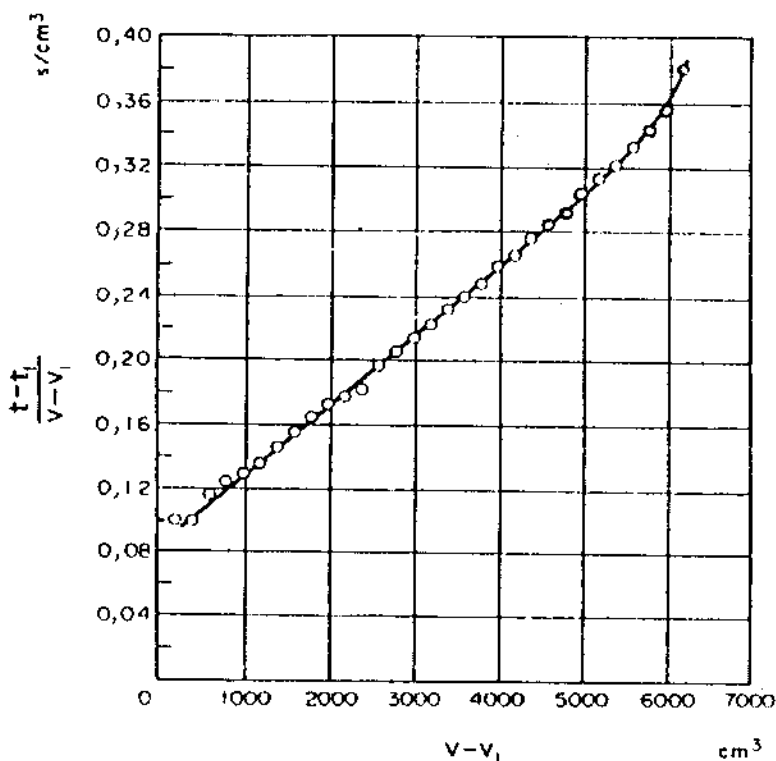
Các bánh lọc có thể được chia làm hai loại: bánh lọc không thể nén và bánh lọc có thể nén. Đối với bánh lọc không thể bị nén, trở kháng của bánh lọc sẽ không bị thay đổi khi dòng chất lỏng tiếp tục đi qua dịch lọc. Ngược lại, đối với bánh lọc có thể nén được, khi dòng chất lỏng đi qua có thể làm cho mật độ các tiểu phân rắn của bánh lọc tăng lên và trở kháng của bánh lọc cũng tăng lên.

Đối với các bánh lọc không thể nén được nữa thì giá trị  $e$  trong phương trình 4.1 được xem là hằng số và như vậy tỉ số  $e^3/[5(1-e)^2S^2]$  phụ thuộc vào bản chất của các tiểu phân rắn tạo thành bánh lọc và được xem là hằng số đối với quá trình lọc. Như vậy, phương trình lọc trong trường hợp này được viết như sau:

$$\frac{1}{A} \frac{dV}{dt} = \frac{-\Delta P}{r\mu l} \quad (4.2)$$

$$r = \frac{5(1-e)^2 S^2}{e^3} \quad (4.3)$$

Phương trình 4.2 là phương trình cơ bản của quá trình lọc và  $r$  là độ trở kháng của bánh lọc phụ thuộc vào  $e$  và  $S$ . Đối với các bánh lọc không thể nén được nữa thì  $r$  là một hằng số phụ thuộc vào tốc độ tạo thành bánh lọc, bản chất của các tiểu phân rắn và lực liên kết giữ các tiểu phân rắn này.



Hình 4.2: Một đường cong thực nghiệm điển hình của quá trình lọc.

#### 4.1.1. Mối quan hệ giữa độ dày của bánh lọc và thể tích dịch lọc

Trong phương trình 4.2, các biến số  $l$  và  $V$  có liên quan với nhau và mối tương quan giữa chúng có thể xác lập được qua cân bằng của các tiểu phân rắn trong dung dịch huyền phù và trong bánh lọc.

- Khối lượng của các tiểu phân rắn trong bánh lọc =  $(1-e)A/\rho_s$  (trong đó  $\rho_s$  là tỉ trọng của bánh lọc).
- Khối lượng của chất lỏng trong bánh lọc =  $eA/\rho$  (trong đó  $\rho$  là tỉ trọng của dịch lọc).

Nếu  $J$  là phần khối lượng của các tiểu phân rắn trong dung dịch huyền phù thì:

$$(1-e)A\rho_s = \frac{(V + eA/\rho) \rho J}{1-J}$$

$$\Leftrightarrow (1-J)(1-e)A/\rho_s = JV\rho + AeJ/\rho$$

Như vậy,

$$l = \frac{JV\rho}{A[(1-J)(1-e)\rho_s - J\rho]} \quad (4.4)$$

$$V = \frac{[(1-J)(1-e)\rho_s - J\rho]Al}{\rho J} \quad (4.5)$$

Gọi  $v$  là thể tích bánh lọc tạo thành trong 1 đơn vị dịch lọc thì:

$$v = \frac{lA}{V} \quad \text{hay} \quad l = \frac{vV}{A} \quad (4.6)$$

và từ phương trình 4.5 suy ra:

$$v = \frac{J\rho}{[(1-J)(1-e)\rho_s - J\rho]} \quad (4.7)$$

Thay vào phương trình 4.2:

$$\frac{1}{A} \frac{dV}{dt} = \frac{(-\Delta P)}{r\mu} \frac{A}{vV}$$

$$\Leftrightarrow \frac{dV}{dt} = \frac{A^2(-\Delta P)}{r\mu vV} \quad (4.8)$$

Phương trình 4.8 được xem là phương trình cơ bản biểu diễn mối quan hệ  $(-\Delta P)$ ,  $V$  và  $t$ . Bây giờ chúng ta sẽ xét phương trình này đối với hai kiểu vận hành: vận hành ở áp suất lọc không đổi và vận hành ở tốc độ lọc không đổi.

➤ Đối với quá trình lọc vận hành với tốc độ lọc không đổi

$$\frac{dV}{dt} = \frac{V}{t} = \text{hằng số}$$

Như vậy,

$$\frac{V}{t} = \frac{A^2 (-\Delta P)}{r\mu v V} \quad (4.9)$$

$$t = \frac{r\mu v}{A^2 (-\Delta P)} V \quad (4.10)$$

và  $(-\Delta P)$  tỉ lệ trực tiếp với  $V$ .

➤ Đối với quá trình lọc vận hành ở áp suất lọc không đổi

$$\frac{V^2}{2} = \frac{A^2 (-\Delta P)t}{r\mu v} \quad (4.11)$$

$$t = \frac{r\mu v}{2A^2 (-\Delta P)} V^2 \quad (4.12)$$

Như vậy, đối với quá trình lọc ở áp suất lọc không đổi, mối quan hệ giữa  $V^2$  và  $t$  hay  $t/V$  và  $V$  là quan hệ tuyến tính.

Trong thực tế, quá trình lọc thường được vận hành ở áp suất không đổi. Tuy nhiên, cần phải lưu ý rằng khi quá trình lọc được vận hành ở điều kiện này thì tốc độ lọc ở các thời điểm khác nhau là khác nhau; nếu trong khoảng thời gian là  $t_1$  lọc được lượng dịch lọc có thể tích là  $V_1$  thì từ phương trình 4.12 suy ra:

$$\frac{1}{2}(V^2 - V_1^2) = \frac{A^2 (-\Delta P)}{r\mu v} (t - t_1) \quad (4.13)$$

Suy ra:

$$\frac{t - t_1}{V - V_1} = \frac{r\mu v}{2A^2 (-\Delta P)} (V + V_1) + \frac{r\mu v V_1}{A^2 (-\Delta P)} \quad (4.14)$$

Như vậy, có một mối quan hệ tuyến tính giữa  $V^2$  và  $t$  và giữa  $(t-t_1)/(V-V_1)$  và  $(V-V_1)$ , với  $(t-t_1)$  là thời gian lọc ở áp suất lọc không đổi và  $(V-V_1)$  là lượng dịch lọc tương ứng nhận được.

#### 4.1.2. Dòng chất lỏng đi qua lớp áo lọc

Trong quá trình lọc, sự chênh lệch về áp suất ở hai phía của màng lọc ảnh hưởng trực tiếp đến tốc độ lọc. Đối với các tiểu phân rắn trong dung dịch huyền phù cần lọc, ngoài việc tạo thành bánh lọc chúng còn khóa các lỗ xốp của bánh lọc và do vậy làm cho trở kháng của áo lọc tăng lên.

#### 4.1.3. Dòng dịch lọc đi qua áo lọc và bánh lọc

Giả sử rằng áo lọc và các lớp đầu tiên của bánh lọc có độ cản trở tương đương với một bánh lọc có độ dày  $L$  được lắng đọng sau đó. Gọi  $\Delta P$  là áp suất chênh lệch giữa hai phía của áo lọc và bánh lọc thì:

$$\frac{1}{A} \frac{dV}{dt} = \frac{(-\Delta P)}{r\mu(l+L)} \quad (4.15)$$

$$\Rightarrow \frac{dV}{dt} = \frac{A(-\Delta P)}{r\mu\left(\frac{vV}{A} + L\right)} = \frac{A^2(-\Delta P)}{vr\mu\left(V + \frac{LA}{v}\right)} \quad (4.16)$$

Khi  $t = 0$  thì  $V = 0$ ; giả sử sau 1 thời gian là  $t_1$  thì thể tích của lượng dịch lọc thu được là  $V_1$ .

➤ Đối với quá trình lọc có tốc độ lọc không đổi:

$$\begin{aligned} \frac{V_1}{t_1} &= \frac{A^2(-\Delta P)}{vr\mu\left(V_1 + \frac{LA}{v}\right)} \\ \Leftrightarrow \frac{t_1}{V_1} &= \frac{vr\mu}{A^2(-\Delta P)} V_1 + \frac{\mu Lr}{A(-\Delta P)} \\ \Leftrightarrow V_1^2 + \frac{LA}{v} V_1 &= \frac{A^2(-\Delta P)}{vr\mu} t_1 \end{aligned} \quad (4.17)$$

➤ Đối với quá trình lọc ở áp suất lọc không đổi:

$$\frac{1}{2}(V^2 - V_1^2) + \frac{LA}{v}(V - V_1) = \frac{A^2(-\Delta P)}{v\mu r}(t - t_1) \quad (4.18)$$

$$\Leftrightarrow (V - V_1 + 2V_1)(V - V_1) + \frac{2LA}{v}(V - V_1) = \frac{2A^2(-\Delta P)}{v\mu r}(t - t_1)$$

$$\Leftrightarrow \frac{t - t_1}{V - V_1} = \frac{r\mu v}{2A^2(-\Delta P)}(V - V_1) + \frac{r\mu v V_1}{A^2(-\Delta P)} + \frac{r\mu L}{A(-\Delta P)} \quad (4.19)$$

Như vậy, có một mối quan hệ tuyến tính giữa  $(t - t_1)/(V - V_1)$  và  $(V - V_1)$  (hình 4.2) và độ dốc của đường thẳng này tỉ lệ với độ cản trở của bánh lọc. Giá trị  $L$  được xác định từ giao điểm của đường thẳng này với trục tung (thông qua hệ số bậc không của  $(V - V_1)$ ).

#### 4.1.4. Các bánh lọc có thể nén được

Hầu như tất cả các bánh lọc đều có thể nén được ở một mức độ nào đó, tuy nhiên đối với các bánh lọc có độ nén rất nhỏ thì thường được coi là các bánh lọc không thể nén được nữa. Tiêu chí để đánh giá khả năng nén là độ cản trở của bánh lọc là một hàm của áp suất tác dụng vào bánh lọc. Hầu hết các bánh lọc thay đổi ít và độ trở kháng của bánh lọc tăng lên khi quá trình lọc được thực hiện ở áp suất cao, bởi vì các tiểu phân rắn sẽ bị nén càng chặt trong bánh lọc. Như vậy, độ trở kháng của bánh lọc sẽ tương ứng với áp suất lớn nhất tác động vào bánh lọc và ngay cả khi áp suất này được duy trì trong một khoảng thời gian rất ngắn. Điều này có ý nghĩa rất lớn đó là trong quá trình lọc, áp suất lọc phải được duy trì ở bất kỳ thời điểm nào sao cho không vượt quá một áp suất vận hành đã tính toán trước.

#### 4.1.5. Rửa bánh lọc

Khi chất lỏng dùng để rửa hòa tan hoàn toàn với dịch lọc và có tính chất vật lý tương tự như dịch lọc thì tốc độ của quá trình rửa ở một áp suất nào đó tương đương với tốc độ cuối cùng của quá trình lọc. Nếu như độ nhớt của chất lỏng dùng để rửa nhỏ hơn thì tốc độ rửa có nhanh hơn so với tốc độ lọc cuối cùng một chút. Tuy nhiên, đôi khi có sự tạo thành các rãnh trong bánh lọc và điều đó làm cho bánh lọc không được rửa một cách hoàn toàn.

Quá trình rửa được xem như gồm hai giai đoạn. Giai đoạn đầu:

$$\frac{\text{thể tích chất lỏng rửa}}{\text{chiều dày của bánh lọc}} = \text{một hằng số} \times \lg \frac{\text{nồng độ ban đầu của dung dịch huyền phù}}{\text{nồng độ của nó ở thời điểm xét}}$$

## 4.2. Các loại thiết bị lọc

### 4.2.1. Bộ lọc nén

Trong bộ lọc nén có hai phần chính đó là đĩa lọc và khung nén. Trong quá trình lọc, độ dày của bánh lọc ảnh hưởng trực tiếp đến tốc độ lọc. Độ dày của bánh lọc càng nhỏ thì tốc độ lọc càng lớn. Tuy nhiên, nếu giữ yêu cầu là bánh lọc mỏng thì trong quá trình lọc chúng ta lại mất nhiều lần tháo dỡ bánh lọc ra và lắp bộ lọc lại. Như vậy, bài toán đặt ra là phải tìm ra một độ dày bánh lọc nào đó để quá trình lọc đạt được hiệu quả lớn nhất.

Đối với một quá trình lọc được vận hành ở áp suất không đổi có phương trình lọc:

$$\frac{t}{V} = \frac{r\mu v}{2A^2(-\Delta P)} V + \frac{r\nu L}{A(-\Delta P)} \quad (4.20)$$

Kết hợp với phương trình 4.10 nhận được:

$$\frac{t}{V} = B_1 V + B_2, \quad (4.21)$$

trong đó:  $B_1, B_2$  là các hằng số. Như vậy, thời gian lọc  $t$  sẽ được xác định qua phương trình sau:

$$t = B_1 V^2 + B_2 V \quad (4.22)$$

Nếu gọi thời gian tháo dỡ bộ lọc để lấy bánh lọc ra là  $t'$  thì tổng thời gian cho một mẻ lọc thu được thể tích dịch lọc  $V$  sẽ là  $t + t'$  và tốc độ thu dịch lọc sẽ là:

$$W = \frac{V}{B_1 V^2 + B_2 V + t'} \quad (4.23)$$

$W$  đạt cực đại khi  $dW/dV = 0$ .

Lấy vi phân  $W$  theo  $V$  rồi cho biểu thức nhận được bằng 0

$$B_1 V^2 + B_2 V + t' - V(2B_1 V + B_2) = 0 \quad (4.24)$$



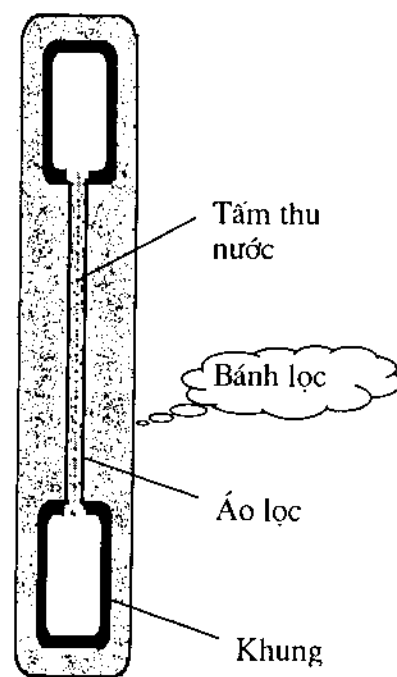
Suy ra:  $t' = B_1 V^2$  (4.25)

và  $V = \sqrt{\frac{t'}{B_1}}$  (4.26)

Nếu như độ trở kháng của môi trường lọc là không đáng kể thì khi thời gian lọc bằng thời gian tháo dỡ bộ lọc để lấy bánh lọc ra và lắp lại bộ lọc lúc đó hiệu suất của quá trình lọc là lớn nhất. Trong thực tế, vì độ trở kháng của bánh lọc là một số khác không (biểu diễn qua số hạng  $B_2 V$ ) nên thời gian dành cho quá trình lọc thường phải lớn hơn so với thời gian tháo dỡ và lắp lại bộ lọc.

#### 4.2.2. Các bộ lọc lá

Bộ lọc lá gồm một số kiểu như bộ lọc Moore, bộ lọc Kerlly, bộ lọc Swissland và bộ lọc Vallez. Ưu điểm của các bộ lọc kiểu lá là có cấu tạo đơn giản, dễ lấy bánh lọc ra, dễ rửa và bánh lọc khít với áo lọc.

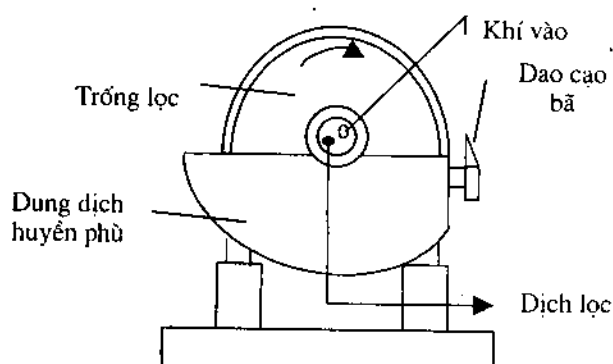


Hình 4.3: Lá lọc của bộ lọc Kerlly.

#### 4.2.3. Bộ lọc trống

Bộ lọc trống gồm một ống hình trụ, hai đầu hình trụ là các bề mặt lọc. Ưu điểm của bộ lọc trống là chi phí vận hành thấp và tỏ ra đặc biệt hiệu quả khi đối tượng cần lọc là các dung dịch huyền phù đậm đặc.

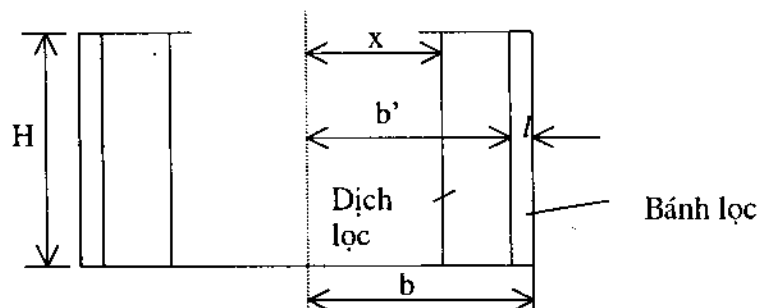
Trước kia bộ lọc trống



Hình 4.4. Sơ đồ thiết bị lọc trống.

thường chỉ được sử dụng trong công nghiệp khai thác mỏ nhưng ngày nay nó được sử dụng rộng rãi trong công nghiệp hóa học ở quy mô lớn.

### 4.3. Lọc bằng máy ly tâm



Hình 4.5: Lọc trong máy ly tâm.

Giả sử quá trình lọc đường thực hiện trong một máy ly tâm với rô ly tâm có đường kính  $b$ , đường kính trong của lớp chất lỏng không đổi. Sau một thời gian lọc  $t$  thì bánh lọc có độ dày  $l$  và đường kính của phần chứa dung dịch huyền phù (tính từ lớp tiếp giáp giữa bánh lọc và huyền phù) bây giờ sẽ là  $b'$ .

Nếu  $dP'$  là sự chênh lệch áp suất trong một vi phân độ dày bánh lọc là  $dl$  thì từ phương trình 4.2 ta viết được phương trình lọc trong trường hợp này như sau:

$$u = \frac{1}{r\mu} \left( -\frac{dP'}{dl} \right) \quad (4.27)$$

trong đó :  $r$  là độ trở kháng xác định của bánh lọc và  $\mu$  là độ nhớt của dịch lọc.

Nếu như lực ly tâm thắng được lực trọng trường thì dòng dịch lọc sẽ đi theo tất cả các hướng (một góc đầy). Khi đó tốc độ lọc được xác định theo phương trình sau:

$$u = \frac{1}{2\pi b'H} \frac{dV}{dt} \quad (4.28)$$

trong đó:  $dV$  là lượng dịch lọc sinh ra trong khoảng thời gian  $dt$ , do đó:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r\mu} \left( -\frac{dP'}{dl} \right) &= \frac{1}{2\pi b'H} \frac{dV}{dt} \\ \Rightarrow -dP' &= \frac{r\mu dl}{2\pi b'H} \frac{dV}{dt} \end{aligned} \quad (4.29)$$

Suy ra:

$$-\Delta P' = \frac{r\mu}{2\mu H} \frac{dV}{dt} \int_0^l \frac{dl}{b'}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{r\mu}{2\mu H} \frac{dV}{dt} \int_{b'}^b \frac{db'}{b'} \\
 &= \frac{r\mu}{2\mu H} \frac{dV}{dt} \ln \frac{b}{b'}
 \end{aligned} \tag{4.30}$$

Nếu như trở kháng của bánh lọc là không đáng kể thì áp suất thu được này cân bằng với áp suất ly tâm. Thông thường người ta qui độ trở kháng của áo lọc bằng độ trở kháng của một bánh lọc có độ dày  $L$  thì áp suất tác dụng qua áo lọc bấy giờ là  $-\Delta P''$  và khi đó phương trình lọc có dạng sau:

$$\begin{aligned}
 \frac{-\Delta P''}{r\mu L} &= \frac{1}{2\pi H b} \frac{dV}{dt} \\
 -\Delta P'' &= \frac{r\mu}{2\pi H} \frac{dV}{dt} \frac{L}{b}
 \end{aligned} \tag{4.31}$$

Như vậy áp suất tổng tác dụng lên cả bánh lọc và áo lọc sẽ là:

$$\begin{aligned}
 (-\Delta P) &= (-\Delta P') + (-\Delta P'') \\
 \Rightarrow -\Delta P &= \frac{r\mu}{2\pi H} \frac{dV}{dt} \left\{ \ln \frac{b}{b'} + \frac{L}{b} \right\}
 \end{aligned} \tag{4.32}$$

Gọi  $v$  là thể tích bánh lọc không thể nén được nữa được tạo thành khi sinh ra một đơn vị thể tích dịch lọc thì:

$$\begin{aligned}
 v dV &= -2\pi b' H db' \\
 \frac{dV}{dt} &= -\frac{2\pi H b'}{v} \frac{db'}{dt}
 \end{aligned} \tag{4.33}$$

Kết hợp với phương trình trên suy ra:

$$-\Delta P = -\frac{r\mu}{2\pi H} \frac{2\pi H b'}{v} \frac{db'}{dt} \left\{ \ln \frac{b}{b'} + \frac{L}{b} \right\} \tag{4.34}$$

$$\frac{v(-dP)}{r\mu} dt = \left\{ \ln \frac{b'}{b} - \frac{L}{b} \right\} b' db' \tag{4.35}$$

Lấy tích phân theo  $b$  và  $b'$  nhận được:

$$\begin{aligned} \frac{(-\Delta)\omega t}{r\mu} &= \int_b^{b'} \left( \ln \frac{b'}{b} - \frac{L}{b} \right) b' db' \\ &= \frac{1}{4} (b^2 - b'^2) + \frac{L}{2b} (b^2 - b'^2) + \frac{1}{2} b'^2 \ln \frac{b'}{b} \end{aligned} \quad (4.36)$$

$$\begin{aligned} (b^2 - b'^2) \left( 1 + 2 \frac{L}{b} \right) + 2b'^2 \ln \frac{b'}{b} &= \frac{4(-\Delta P)\omega t}{r\mu} \\ &= \frac{2v\mu\rho\omega^2}{r\mu} (b^2 - x^2) \end{aligned} \quad (4.37)$$

$$-\Delta P = \frac{1}{2} \rho \omega^2 (b^2 - x^2) \quad (4.38)$$

trong đó:  $\omega$  (rad/s) là vận tốc góc máy ly tâm.

Từ phương trình này thời gian cần để hình thành bánh lọc dày  $b'$  có thể tính toán được. Thể tích bánh lọc tương ứng cho bởi công thức:

$$V_v = \pi(b^2 - b'^2)H \quad (4.39)$$

Thể tích dịch lọc:

$$V = \frac{\pi}{v} (b^2 - b'^2) H \quad (4.40)$$

#### 4.4. Một số bài tập đặc thù với kỹ thuật lọc

##### Bài toán 1

Giả sử có một dung dịch huyền phù nước được lọc trong một máy lọc nén có 2 khung, mỗi khung dày 50 mm và có diện tích bề mặt là 150 mm<sup>2</sup>. Quá trình lọc được tiến hành ở áp suất 450 kN/m<sup>2</sup> và thời gian lọc là 3500s. Cần thời gian bao nhiêu để một máy ly tâm với rô quay có đường kính là 300 mm và sâu 200 mm lọc được một thể tích dịch lọc tương đương với máy lọc nén thực hiện trong thời gian đã nêu trên. Giả sử bán kính trong của rô quay ly tâm là 75 mm và tốc độ quay của máy là 65 Hz.

Giả thiết rằng bánh lọc thì không thể nén được nữa và độ cản trở của lớp áo lọc trong mọi trường hợp tương đương với một bánh lọc có độ dày 3 mm.

Lời giải

- Đối với bộ lọc nén:

$$V^2 + 2 \frac{Al}{v} V = \frac{2(-\Delta P)At^2}{r\mu v} \quad (V=0 \text{ khi } t=0)$$

(theo pt 4.1)

Mặt khác, từ pt 4.6

$$V = \frac{lA}{v}$$

Suy ra:

$$\begin{aligned} \frac{l^2 A^2}{v^2} + \frac{2AL}{v} \frac{lA}{v} &= \frac{2(-\Delta P)A^2 t}{r\mu v} \\ \Rightarrow l^2 + 2Ll &= \frac{2(-\Delta P)vt}{r\mu} \end{aligned}$$

Đối với giai đoạn lọc đầu tiên:

$$l = 25 \text{ mm}; L = 3 \text{ mm} = 0,003 \text{ m}$$

$$-\Delta P = (450 - 101,3) = 348,7 \text{ kN/m}^2 = 4,39 \times 10^5 \text{ N/m}^2$$

$$\Rightarrow t = 3500 \text{ s}$$

$$\Rightarrow 0,25^2 + (2 \times 0,003 \times 0,025) = 2 \times 4,39 \times 10^5 \times 3500 \times \frac{v}{r\mu}$$

$$\Rightarrow \frac{r\mu}{v} = 3,15 \times 10^{12}$$

- Đối với máy ly tâm:

$$(b^2 - b'^2) \left( 1 + 2 \frac{L}{b} \right) + 2b'^2 \ln \frac{b'}{b} = \frac{2v\tau\rho\omega^2}{r\mu} (b^2 - x^2) \quad (\text{pt 4.5})$$

$$b = 0,15 \text{ m}$$

$$H = 0,20 \text{ m}$$

$$\text{Thể tích của bánh lọc} = 2 \times 0,050 \times 0,15^2 = 0,00225 \text{ m}^3$$

$$\Rightarrow \pi(b^2 - b'^2) \times 0,20 = 0,0025$$

$$\Rightarrow \pi(b^2 - b'^2) = 0,00358$$

$$b'^2 = 0,15^2 - 0,00358 = 0,0189$$

$$b' = 0,138 \text{ m}$$

$$x = 75 \text{ mm} = 0,075 \text{ m}$$

$$\omega = 65 \times 2\pi = 408,4 \text{ rad / s}$$

Vậy, thời gian cần thiết để nhận được một thể tích dịch lọc hoặc bánh lọc tương đương với thể tích nhận được từ máy lọc nén là:

$$\begin{aligned} & (0,15^2 - 0,138^2)(10 + 2 \times 0,003/0,15) + 2(0,0189)\ln(0,138/0,15) \\ &= \frac{2t(1000)408,4^2}{3,15 \times 10^{12}} (0,15^2 - 0,075^2) \end{aligned}$$

$$0,00359 - 0,00315 = 1,787 \times 10^{-6} \text{ t}$$

$$\Rightarrow \frac{4,4 \times 10^{-4}}{1,787 \times 10^{-6}} = 246 \text{ s} = (4 \text{ phút})$$

### Bài toán 2

Một hỗn hợp huyền phù được lọc trong một máy lọc khung nén chứa 12 đĩa lọc, mỗi đĩa lọc có diện tích bề mặt  $0,3 \text{ m}^2$  và dày 25 mm. Trong 200 s đầu tiên, áp suất lọc tăng chậm và đạt đến giá trị  $500 \text{ kN/m}^2$  và trong suốt quá trình lọc này tốc độ lọc không đổi. Sau giai đoạn lọc thứ nhất, áp suất lọc được giữ không đổi và bánh lọc được tạo thành một cách hoàn toàn sau 900 s. Các bánh lọc sau đó được rửa ở áp suất  $375 \text{ kN/m}^2$  trong vòng 600 s, sử dụng quá trình rửa sạch hoàn toàn. Hãy xác định thể tích của dịch lọc thu được và thể tích nước rửa cần dùng trong mỗi mẻ lọc.

Trước đó người ta đã tiến hành lọc mẫu huyền phù thử nghiệm trong một bộ lọc lá chân không với diện tích bề mặt là  $0,05 \text{ m}^2$  và áp suất chân không đạt  $30 \text{ kN/m}^2$ . Thể tích dịch lọc thu được trong 300 s đầu tiên là  $250 \text{ cm}^3$  và trong 300 s tiếp theo đó là  $150 \text{ cm}^3$ . Giả sử bánh lọc không thể nén được nữa và độ trở kháng của áo lọc và lá lọc là tương đương nhau.

### Lời giải

- Trong bộ lọc lá, lúc đầu quá trình lọc được tiến hành ở áp suất lọc không đổi. Vì vậy, phương trình lọc như sau (từ p.t 4.18):

$$V^2 + 2 \frac{AL}{v} V = 2 \frac{(\Delta P)A^2}{r\mu v} t$$

- Đối với bộ lọc nén, đầu tiên quá trình lọc được tiến hành ở tốc độ lọc không đổi và nhận được một lượng thể tích  $V_1$  trong khoảng thời gian  $t_1$ , sau đó quá trình lọc được giữ ở áp suất không đổi.

Vì vậy

$$V_1^2 + 2 \frac{AL}{v} V_1 = 2 \frac{(\Delta P)A^2}{r\mu v} t_1 \quad (\text{từ pt 4.17})$$

và

$$(V^2 - V_1^2) + 2 \frac{AL}{v} (V - V_1) = 2 \frac{(\Delta P)A^2}{r\mu v} (t - t_1) \quad (\text{từ pt 4.18})$$

- Đối với bộ lọc lá

Khi quá trình lọc tiến hành được 300 s thì lượng dịch lọc tương ứng là 250  $\text{cm}^3$  còn khi thời gian lọc là 600 s thì lượng dịch lọc thu được là 400  $\text{cm}^3$ . Với diện tích của mặt lá lọc là 0,05  $\text{m}^2$  và áp suất của quá trình lọc là  $(101,3-30)=71,3$   $\text{kN/m}^2$ .

Vì vậy

$$250^2 + 2(0,5L/v)250 = 2(71,3 \cdot 0,05^2 / r\mu v)300$$

và

$$400^2 + 2(0,5L/v)400 = 2(71,3 \times 0,05^2 / r\mu v) 600$$

Viết lại các biểu thức trên:

$$62500 + 25 \frac{L}{v} = \frac{106,95}{r\mu v}$$

và

$$160000 + 40 \frac{L}{v} = \frac{213,9}{r\mu v}$$

Suy ra

$$L/v = 35000 ; r\mu v = 7,13 \times 10^{-4}$$

- Đối với bộ lọc nén:

Trong khi thiết bị được vận hành ở tốc độ không đổi thì lượng dịch lọc thu được có thể tích là  $V_1$ . Các thông số thiết bị và thông số vận hành:

$$A=2,16 \text{ m}^2, -\Delta P = (500-101,3) = 398,7 \text{ kN/m}^2, t = 200 \text{ s}$$

Thay các số trên vào phương trình lọc nhận được:

$$\begin{aligned} V_1^2 + 2,16 \times 3500 V_1 &= (398,7 \times (2,16)^2 / 7,13 \times 10^{-4}) 200 \\ \Leftrightarrow V_1^2 + 7560 V_1 - 5,218 \times 10^8 &= 0 \end{aligned}$$

Suy ra:

$$V_1 = -3780 + \sqrt{(1,429) \times 10^7 + (5,281) \times 10^8} = 1,937 \times 10^4 \text{ cm}^3$$

Khi quá trình lọc được tiến hành ở áp suất không đổi:

$$t - t_1 = 900 \text{ s}$$

Vì vậy, thể tích dịch lọc thu được trong điều kiện làm việc này của thiết bị lọc là:

$$(V^2 - 3,75 \times 10^8) + 15,120(V - 1,937 \times 10^4) = 5,218 \times 10^6 \times 900$$

Biến đổi biểu thức:

$$V^2 + 15,120 V - 53,64 \times 10^8 = 0$$

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow V &= -7560 + \sqrt{(5,715) \times 10^7 + (53,64) \times 10^8} \\ V &= 6,607 \times 10^4 \text{ cm}^3 \text{ hay } 0,066 \text{ m}^3 \end{aligned}$$

Tốc độ lọc cuối của quá trình lọc là:

$$\begin{aligned} &= \frac{-\Delta P(A^2)}{r\mu v(V + AL \cdot v)} \quad (\text{theo pt. 4.16}) \\ &= \frac{(398,7)(2,16)^2}{7,13 \times 10^{-4}(6,607 \times 10^4 + 2,16 \times 3500)} = 35,4 \text{ cm}^3/\text{s} \end{aligned}$$

Nếu coi độ nhớt của dịch lọc tương đương với độ nhớt của nước rửa thì:

- ✓ Tốc độ rửa ở  $500 \text{ kN/m}^2 = 35,4 \text{ cm}^3/\text{s}$ .
- ✓ Tốc độ rửa ở  $375 \text{ kN/m}^2 = 35,4 (375 - 101,3)/(500 - 101,3) = 24,3 \text{ cm}^3/\text{s}$ .

Như vậy thể tích nước rửa trong  $600 \text{ s} = (600 \times 24,3) = 1,458 \times 10^4 \text{ cm}^3$  hay  $0,0146 \text{ m}^3$ .



Bài toán 3

Một dung dịch huyền phù, chứa 0,2 kg chất rắn (tỉ trọng 3,0) trong 1 kg nước, được lọc bằng một bộ lọc trống quay dài 0,6 m và có đường kính 0,6 m. Trống lọc quay với tốc độ 350 vòng/s và luôn có 20% bề mặt lọc tiếp xúc với dung dịch huyền phù. Độ dày của bánh lọc sẽ là bao nhiêu khi quá trình lọc được tiến hành ở áp suất 35 kN/m<sup>2</sup> nếu quá trình lọc được thực hiện với tốc độ tạo thành dịch lọc là 0,125 kg/s và độ rỗng của bánh lọc là 0,5.

Nếu bộ lọc quay bị hỏng và quá trình lọc tạm thời được tiến hành trong một thiết bị lọc khung nén với các khung có diện tích là 0,3 m<sup>2</sup>. Đối với thiết bị lọc này, mỗi mẻ lọc cần 100s để lắp và cũng bằng chừng đó thời gian để dỡ ra. Ngoài ra còn cần 100s nữa để lấy các bánh lọc ra khỏi khung lọc. Cần số khung lọc ít nhất là bao nhiêu nếu quá trình lọc được thực hiện ở áp suất 275 kN/m<sup>2</sup> và đạt được tốc độ bằng với quá trình lọc trước đó. Giả sử các bánh lọc là không thể nén được nữa và bỏ qua độ trở kháng của môi trường lọc.

Lời giải

- Đối với bộ lọc trống:

$$\text{Diện tích của bề mặt lọc} = 0,6 \times 0,6 \pi = 0,36 \pi \text{ m}^2$$

$$\text{Tốc độ lọc} = 0,125 \text{ kg/s}$$

$$= \frac{0,125}{1000} = 1,25 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s} \text{ dịch lọc}$$

Tốc độ thể tích chất rắn thu được từ dung dịch huyền phù sẽ là:

$$= 1,25 \times 10^{-4} (0,2) \times \left( \frac{1}{0,5} \right) \left( \frac{1}{3,0} \right) = 1,67 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$$

Do trống lọc quay hết 350s một vòng và chỉ có 20% diện tích bề mặt trống lọc được ngâm trong dung dịch huyền phù nên thời gian diện tích bề mặt trống lọc được ngâm là  $350 \times 0,2 = 70\text{s}$ .

Thể tích bánh lọc được tạo thành do các hạt huyền phù sa lắng trong 1 vòng quay của trống lọc sẽ là  $1,67 \times 10^{-5} \times 350 = 5,85 \times 10^{-3} \text{ m}^3$ .

Khi đó độ dày của bánh lọc tạo thành sẽ là:

$$\frac{5,85 \times 10^{-3}}{0,36\pi} = 5,2 \times 10^{-5} \text{ m} = 5,2 \text{ mm}$$

Các đặc điểm của bánh lọc

Từ phương trình lọc:

$$\frac{dV}{dt} = \frac{-\Delta P(A)}{r\mu l} = \frac{-\Delta P(A^2)}{r\mu Vv}$$

Thay các giá trị áp suất, diện tích và thời gian với các đơn vị tương ứng của chúng là  $\text{kN/m}^2$ ,  $\text{m}^2$  và  $\text{m}^3$  thì đối với một vòng trống quay:

$$(1,25 \times 10^{-4} \times 350)^2 = K(101,3 - 35)(0,36\pi)^2 \times 70$$

$$K = 3,22 \times 10^7$$

- Đối với bộ lọc nén:

Giả sử cái lọc nén có  $n$  khung lọc có độ dày là  $d$  m.

Toàn bộ thời gian dùng để thực hiện một mẻ lọc sẽ là:  $t_f + 100n + 200s$ .

Trong đó  $t_f$  là thời gian để lọc một mẻ.

Khi đó tốc độ lọc sẽ là:

$$\frac{V_f}{t_f + 100n + 200} = 1,25 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$$

trong đó:  $V_f$  là tổng thể tích dịch lọc mỗi mẻ.

Mà thể tích của dịch lọc = Thể tích của các khung lọc/thể tích của bánh lọc được tạo thành từ một đơn vị thể tích dịch lọc.

Suy ra, thể tích của dịch lọc  $V_f =$

$$= \frac{(0,3)^2 nd}{0,2 \times (0,5)(3,0)} = 0,675nd$$

$$V_f^2 = (3,33) \times 10^{-7} (275 - 101,3)(2n \times 0,3 \times 0,3)^2 t_f$$

$$\Rightarrow t_f = 2,576 \times 10^5 d^2$$

Như vậy:

$$1,25 \times 10^{-4} = \frac{0,675nd}{2,576 + 10^5 d^2 + 100n + 200}$$

$$\Leftrightarrow 31,45d^2 + 0,0125n + 0,0250 = 0,675nd$$

Suy ra: 
$$n = \frac{0,0250 + 31,45d^2}{0,675 - 0,0125}$$

n nhận cực trị khi  $dn/dd = 0$ , tức là khi:

$$(0,65d - 0,0125) \times 62,9d - (0,0250 + 32,45d^2) \times 0,675 = 0$$

$$d^2 - 0,0370d - 0,000796 = 0$$

$$d = 0,0185 \pm \sqrt{0,000343 + 0,000796} = 0,0522 = 52,2 \text{ mm}$$

Vậy,

$$\begin{aligned} n &= \frac{0,0250 + 31,45 \times (0,0522)^2}{0,675 \times (0,0522) - 0,0125} \\ &= 4,87 \end{aligned}$$

Như vậy số khung tối thiểu cần thiết để đáp ứng yêu cầu trên là 5 khung.

Khi sử dụng 5 khung lọc thì:

$$0,0250 + 31,45d^2 = 3,375d - 0,0625$$

$$\Leftrightarrow d^2 - 0,107 + 0,00278 = 0$$

$$\Rightarrow d = 0,0535 \pm \sqrt{0,00285 - 0,00278}$$

$$d_1 = 0,044 \text{ m}; d_2 = 0,063 \text{ m}$$

Như vậy, các khung lọc nằm có kích thước nằm trong khoảng từ 44 đến 63 mm sẽ đáp ứng được nhiệm vụ lọc đề ra. Trong thực tế, người ta sử dụng các khung lọc có kích thước là 2 inch (50,4 mm).

#### Bài toán 4

Một hỗn hợp huyền phù được lọc trong một bộ lọc nén khung với các khung lọc có kích thước 25 mm. Trong 600s đầu tiên, bơm hoạt động ở công suất cực đại. Trong thời gian này, áp suất tăng dần đến  $415 \text{ kN/m}^2$  và nhận được một thể tích dịch lọc bằng  $1/4$  trong tổng thể tích dịch lọc thu được. Quá trình lọc này được thực hiện thêm 3600s nữa thì dừng lại. Thời gian chuẩn bị sẵn sàng cho một mẻ lọc mới là 900s.

Người ta thấy rằng nếu như áo lọc được phủ trước bởi một lớp phụ có độ dày 1,6mm thì trở kháng của lớp áo lọc sẽ giảm xuống còn  $1/4$  so với giá trị ban đầu. Tốc độ lọc sẽ tăng bao nhiêu phần trăm nếu lớp phụ được phủ trên áo lọc còn có tác dụng đến 180 s.

Lời giảiTrường hợp 1:

Từ phương trình lọc:

$$\frac{dV}{dt} = \frac{A^2(-\Delta P)}{\nu \mu \left( V + \frac{AL}{v} \right)} = \frac{a}{V+b}$$

Khi quá trình lọc được thực hiện ở tốc độ không đổi thì:

$$\begin{aligned} \frac{V_0}{t_0} &= \frac{a}{V_0+b} \\ \Leftrightarrow V_0^2 + bV_0 &= at_0 \end{aligned}$$

Khi quá trình lọc được tiến hành ở áp suất không đổi:

$$\frac{1}{2}(V^2 - V_0^2) + b(V - V_0) = a(t - t_0)$$

Với  $t_0 = 600s$ ,  $t - t_0 = 3600s$ ,  $V_0 = \frac{V}{4}$  ta có:

$$\begin{aligned} \frac{V^2}{16} + b \frac{V}{4} &= 600a \\ \frac{1}{2} \left( V^2 - \frac{V^2}{16} \right) + b \left( V - \frac{V}{4} \right) &= 3600a \\ \Leftrightarrow 3600a &= \left( \frac{1}{3} \right) \left( \frac{5}{2} \right) + \frac{3}{4}bV = \frac{3}{8}V^2 + \frac{3}{2}bV \\ \Rightarrow b &= \frac{V}{8} \\ a &= \frac{1}{600} \left( \frac{V^2}{16} + \frac{V^2}{32} \right) = \frac{3}{19200} V^2 \end{aligned}$$

Tổng thời gian dành cho một mẻ =  $900 + 4200 = 5100$  s

Tốc độ lọc tính theo đơn vị thời gian giây (s) =  $V/5100 = 0,000196V$  ( $m^3/s$ ).

Trường hợp hai:

Từ phương trình lọc:

$$\frac{V_1}{t_1} = \frac{a}{V_1 + \frac{b}{4}} = \frac{V_0}{t_0} = \frac{a}{V_0 + b}$$

$$\frac{1}{2} \left( \frac{49}{64} V^2 - V_1^2 \right) + \frac{b}{4} \left( \frac{7}{8} V - V_1 \right) = a(t - t_1)$$

Suy ra:

$$\frac{V}{2400} = \frac{\frac{3}{19200} V^2}{V_1 + \frac{V}{32}}$$

$$t_1 = \frac{t_0}{V_0} V_1 = \frac{600}{\frac{V}{4}} \times \frac{11}{32} V = \frac{3300}{4} = 825 \text{ s}$$

Thay trở lại phương trình trên:

$$\frac{1}{2} \left( \frac{49}{64} V^2 - \frac{121}{1024} V_1^2 \right) + \frac{1}{4} \frac{V}{8} \left( \frac{7}{8} V - \frac{11}{32} V \right) = \frac{3}{19200} V^2 (t - t_1)$$

$$\Leftrightarrow 3600a = \left( \frac{49}{128} \right) - \left( \frac{121}{2048} \right) + \left( \frac{17}{1024} \right) = \frac{3}{19200} (t - t_1)$$

$$(t - t_1) = \frac{19200}{3} \times \frac{784 - 121 + 34}{2048} = 2178 \text{ s}$$

Tổng thời gian dành cho một mẻ lọc = 180 + 900 + 825 + 2178 = 4083.

Tốc độ lọc tính theo đơn vị thời gian giây (s):

$$\frac{7}{8} \times \frac{V}{4083} = 0,000214 \text{ V}$$

Vậy, sự tăng của tốc độ lọc:

$$\frac{(0,000214 - 0,000196) \text{ V}}{0,000196 \text{ V}} = 9,1\%$$

## BÀI TẬP CHƯƠNG 4

### Bài 4.1

Một cái lọc trống quay có diện tích bề mặt là  $3 \text{ m}^2$  vận hành ở áp suất trong bằng  $30 \text{ kN/m}^2$  và 30% bề mặt của trống này được nhúng trong hỗn hợp huyền phù. Hãy tính tốc độ lọc và độ dày của bánh lọc khi trống lọc quay ở tốc độ  $0,0083 \text{ Hz}$  (0,5 vòng/phút) và coi như bánh lọc không thể nén được nữa, độ trở kháng của lớp áo lọc tương đương với 1 mm bánh lọc. Nếu tăng tốc độ lọc bằng cách tăng tốc độ quay của trống và bánh lọc mỏng nhất mà có thể chuyển được ra từ trống lọc là 5 mm. Hãy tính vận tốc quay cần thiết của trống lọc để tốc độ lọc đạt cực đại.

Biết rằng:

Độ rỗng của bánh lọc là 0,4.

Độ cản riêng của bánh lọc là  $2 \times 10^{12} / \text{m}^2$ .

Tỉ trọng của các hạt rắn là  $2000 \text{ kg/m}^3$ .

Tỉ trọng của dịch lọc là  $1000 \text{ kg/m}^3$ .

Độ nhớt của dịch lọc là  $10^{-3} \text{ Ns/m}^2$ .

Hỗn hợp huyền phù chứa 20 % chất rắn.

### Bài 4.2

Một hỗn hợp huyền phù chứa 100 kg bột đá vôi (bột nhẹ) (có tỉ trọng 3,0) trong một  $\text{m}^3$  nước được lọc trong một máy lọc nén khung. Để thực hiện được một vòng hoàn toàn (gồm các quá trình tháo dỡ, làm sạch và sắp xếp lại) hết 900 s. Giả thiết rằng bánh lọc khi được chuyển ra là không thể nén được nữa và có khoảng rỗng là 0,4. Hãy tìm độ dày tối ưu của bánh lọc khi áp suất lọc là  $100 \text{ kN/m}^2$ .

Độ dày tối ưu của bánh lọc thay đổi như thế nào nếu rửa bánh lọc với áp suất là  $500 \text{ kN/m}^2$  và thể tích nước rửa bằng  $\frac{1}{4}$  thể tích dịch lọc. Bỏ qua trở kháng của thiết bị lọc và lấy độ nhớt của nước là  $1 \text{ mNs/m}^2$ . Trong một thí nghiệm khác khi áp suất của quá trình lọc là  $165 \text{ kN/m}^2$  tạo ra dòng dịch lọc là  $0,06 \text{ cm}^3/\text{s}$  qua  $1 \text{ cm}^2$  bánh lọc.

**Bài 4.3**

Người ta sử dụng một đĩa lọc và máy nén khung để lọc một hỗn hợp huyền phù và lọc được  $8\text{ m}^3$  dịch lọc sau 1800 s,  $11\text{ m}^3$  dịch lọc sau 3600 s. Tính thời gian rửa trong giai đoạn thứ hai nếu sử dụng hết  $3\text{ m}^3$  nước để rửa. Biết rằng độ trở kháng của áo lọc là không đáng kể và áp suất của quá trình lọc được giữ không đổi trong suốt quá trình lọc.

**Bài 4.4**

Trong quá trình lọc một hỗn hợp huyền phù, ở giai đoạn đầu tốc độ lọc là không đổi và bơm làm việc hết công suất, áp suất đạt tới  $400\text{ kN/m}^2$ .

Sau đó áp suất được giữ lại ở giá trị này trong suốt thời gian lọc còn lại. Quá trình làm việc ở áp suất không đổi là 900 s, một phần ba trong tổng thể tích dịch lọc nhận được trong thời gian này.

Bỏ qua trở kháng của môi trường lọc, hãy xác định:

- Tổng thời gian lọc.
- Thời gian của một vòng lọc nếu việc chuyển bánh lọc và việc sắp xếp lại máy nén là 1200 s. Bánh lọc không được rửa.

**Bài 4.5**

Một cái lọc quay vận hành ở  $0,03\text{ Hz}$ , lọc  $0,0075\text{ m}^3/\text{s}$ , trong điều kiện chân không và bỏ qua trở kháng của lớp áo lọc. Hãy tính tốc độ cái lọc cần phải làm việc để tốc độ dịch lọc sinh ra là  $0,0160\text{ m}^3/\text{s}$ .

**Bài 4.6**

Một cái lọc trống quay có đường kính  $1,2\text{ m}$  và dài  $1,2\text{ m}$  có thể lọc được  $6,0\text{ kg}$  hỗn hợp huyền phù trong một giây nếu hỗn hợp huyền phù đó chứa 10% chất rắn và cái lọc trống quay đó quay với vận tốc  $0,005\text{ Hz}$ .

Khi tăng vận tốc vòng quay của cái lọc trống quay đó đến  $0,008\text{ Hz}$  thì thiết bị lọc này có thể lọc được  $7,2\text{ kg}$  hỗn hợp huyền phù đó trong một giây. Hãy xác định sự thay đổi về lượng nước rửa đối với mỗi kg bánh lọc (tính theo phần trăm) khi tốc độ quay của trống lọc tăng. Xác định tốc độ lọc tối đa mà thiết bị này có thể đạt được.

**Bài 4.7**

Một hỗn hợp huyền phù được lọc trong một máy lọc nén khung chứa đầy các khung lọc hình vuông có cạnh là 50 mm. Trong 3600 s đầu tiên, máy bơm chạy ở dung lượng cực đại. Trong suốt thời gian này áp suất tăng dần đến 500 kN/m<sup>2</sup> và nhận được thể tích dịch lọc bằng một phần tư tổng thể tích dịch lọc trong suốt quá trình lọc. Trong 3600 s tiếp theo của quá trình lọc được thực hiện ở áp suất không đổi và cần có 900 s để tháo dỡ và lắp đặt lại máy nén.

Người ta thấy rằng, nếu áo lọc được phủ bên ngoài bằng một lớp chất trợ lọc dày 1,6 mm, độ cản của lớp áo lọc được giảm xuống bằng một phần tư so với giá trị ban đầu. Những yếu tố nào sẽ tăng khi trong suốt quá trình đưa hỗn hợp cần lọc vào máy nếu chất phủ bên ngoài được sử dụng trong 180 s?

**Bài 4.8**

Quá trình lọc được thực hiện trong một máy lọc nén khung với 20 khung hình vuông có cạnh 0,3 m và dày 50 mm, tốc độ của quá trình lọc được giữ không đổi trong 300 s đầu tiên. Kết thúc giai đoạn này áp suất tăng đến 350 kN/m<sup>2</sup> và nhận được lượng dịch lọc bằng một phần tư tổng thể tích dịch lọc trong một vòng. Tiếp đó, quá trình lọc được thực hiện ở áp suất 350 kN/m<sup>2</sup> trong 1800 s nữa, lúc này các khung lọc đã chứa đầy các hạt huyền phù.

Tổng thể tích dịch lọc trong một vòng là 0,7 m<sup>3</sup> và thời gian dùng để tháo dỡ và lắp đặt lại máy lọc là 500 s.

Trên một cái lọc trống quay dài 1,5 m và có đường kính là 2,2 m ở vị trí của máy lọc nén. Giả sử rằng độ cản của lớp áo lọc tương đương trên hai máy và bánh lọc không thể nén thêm được nữa. Hãy tính tốc độ quay của trống khi quá trình lọc trên cái lọc trống quay có cùng tốc độ lọc so với máy lọc nén. Quá trình lọc ở máy lọc quay được thực hiện ở áp suất không đổi là 70 kN/m<sup>2</sup> và trong quá trình lọc luôn có 25% trống quay được ngâm trong hỗn hợp huyền phù.

**Bài 4.9**

Người ta cần lọc một hỗn hợp huyền phù để tạo ra 2,25 m<sup>3</sup> dịch lọc trong một ngày làm việc 8 h. Quá trình này được thực hiện trong một máy lọc nén khung với các khung hình vuông có cạnh là 0,45 m và áp suất làm việc 450 kN/m<sup>2</sup>.



Áp suất làm việc được tăng một cách từ từ trong khoảng thời gian 300 s và trong suốt thời gian này tốc độ lọc được giữ ở giá trị không đổi.

Khi đã kết thúc quá trình lọc dung dịch huyền phù trên, sử dụng áp suất 35 kN/m<sup>2</sup> trên cái lọc lá đơn với diện tích lọc là 0,05 m<sup>2</sup>, thu được 450 cm<sup>3</sup> dịch lọc trong 300 s đầu tiên của quá trình lọc và thu được thêm 400 cm<sup>3</sup> dịch lọc nữa trong 600 s tiếp theo đó. Giả sử rằng thời gian dành cho việc tháo dỡ máy lọc nén, chuyển các bánh lọc ra và lắp đặt lại máy lọc nén là 300 s, và thêm 180 s để tạo ra một bánh lọc, hãy tính số khung lọc tối thiểu cần dùng cho yêu cầu lọc trên. Biết rằng độ cản của lớp áo lọc được coi là tương đương với các thử nghiệm trong phòng thí nghiệm trên máy.

#### **Bài 4.10**

Một hỗn hợp huyền phù chứa 40% trọng lượng chất rắn được lọc qua một cái lọc trống quay có đường kính 2 m và dài 2 m và trong điều kiện vận hành bình thường thì luôn có 40% diện tích bề mặt của trống quay được nhúng trong hỗn hợp huyền phù ở áp suất 17 kN/m<sup>2</sup>. Trong thí nghiệm lọc hỗn hợp huyền phù trên cái lọc lá có diện tích 200 cm<sup>2</sup> được phủ một lớp áo lọc tương tự như lớp áo lọc trên cái lọc trống, ở áp suất tuyệt đối 17 kN/m<sup>2</sup> thì thu được 300 cm<sup>3</sup> dịch lọc trong 60 s đầu tiên và trong 60 s tiếp theo thu được 140 cm<sup>3</sup> dịch lọc.

Khối lượng riêng của bánh lọc khô là 1500 kg/m<sup>3</sup> và khối lượng riêng của dịch lọc là 1000 kg/m<sup>3</sup>, độ dày tối thiểu của bánh lọc mà có thể chuyển ra khỏi lớp áo lọc là 5 mm.

Hãy tìm tốc độ quay của trống để tốc độ lọc đạt cực đại và hãy tính trọng lượng của hỗn hợp huyền phù được đưa vào trong một đơn vị thời gian.

#### **Bài 4.11**

Trong công nghiệp, người ta sử dụng một cái lọc trống quay để lọc một hỗn hợp huyền phù và sinh ra 0,002 m<sup>3</sup> dịch lọc/s. Một hỗn hợp huyền phù mẫu được tiến hành lọc thử nghiệm trên một cái lọc nhỏ có diện tích bề mặt là 0,023 m<sup>2</sup> và vận hành sao cho tốc độ lọc được giữ ở giá trị không đổi là 12,5 cm<sup>3</sup>/s. Sự thay đổi về áp suất trong quá trình lọc thử nghiệm như sau: tăng từ 14 kN/m<sup>2</sup> sau 300 s tiến hành lọc đến 28 kN/m<sup>2</sup> sau 500 s và lúc này độ dày của lớp bánh lọc là 38 mm.

Hãy đưa ra kích thước và các điều kiện vận hành phù hợp đối với cái lọc trống quay, giả sử rằng độ cản của lớp áo lọc được sử dụng bằng 1,5 lần so với cái lọc thử nghiệm, và hệ thống chân không có khả năng duy trì một chênh lệch áp suất là  $70 \text{ kN/m}^2$  trong suốt quá trình lọc.

# **ĐÁP SỐ VÀ HƯỚNG DẪN PHẦN I**

## CHƯƠNG 1: PHƯƠNG PHÁP CHUNG CẤT

### Bài 1.1

Tỉ số hồi lưu cực tiểu  $R_m = 2,71$

### Bài 1.2

18 đĩa lý thuyết

### Bài 1.3

Số đĩa lý thuyết cần thiết để đáp ứng nhiệm vụ tách trên là 8 và vị trí của dòng phụ là ở đĩa thứ 4.

### Bài 1.4

$$n = 14$$

### Bài 1.5

Số đĩa lý thuyết 9 đĩa.

Số đĩa thực tế 13 đĩa.

### Bài 1.6

$$R_m = 1,08$$

$$d = 1,32 \text{ m}$$

### Bài 1.7

- a) Tốc độ dòng khối lượng cuối cột = 2,4 kg/s  
Tốc độ dòng khối lượng đầu cột = 1,6 kg/s
- b) 10 đĩa lý thuyết

c) 17 đĩa thực tế

### Bài 1.8

10 đĩa lý thuyết

17 đĩa thực tế

Nạp nguyên liệu vào đĩa thứ 5

### Bài 1.9

12 đĩa lý thuyết

Độ dốc nhỏ nhất của đường làm việc trên phải tương ứng với số bậc lý thuyết vô hạn. Dữ liệu đường cong cân bằng lỏng-hơi được cho trong bài 1.8.

Nếu như độ dốc của đường làm việc trên vẫn không đổi thì độ dốc của đường làm việc được xác định là  $L_n/V_n = 0,51$ .

### Bài 1.10

$x = 0,335$

Số đĩa lý thuyết cần là 5 đĩa .

### Bài 1.11

| Nguyên liệu            | Số đĩa lý thuyết |               |      |
|------------------------|------------------|---------------|------|
|                        | Phần sục hơi     | Phần tinh chế | Tổng |
| Trạng thái hơi bão hòa | 4                | 5             | 9    |
| Trạng thái lỏng        | 4                | 3             | 7    |

### Bài 1.12

10 đĩa lý thuyết

## Bài 1.13

a)

| Cấu tử | $\alpha$ | x    | $\alpha x_i$ | $y_i = x_i$  | $y_i = x_2$ |
|--------|----------|------|--------------|--------------|-------------|
| B      | 2,40     | 0,60 | 1,440        | 0,808        | 1,164       |
| T      | 1,00     | 0,30 | 0,300        | 0,168        | 0,168       |
| X      | 0,43     | 0,10 | 0,043        | 0,024        | 0,010       |
|        |          |      | 1,783        | <u>1,000</u> | 1,342       |

| Cấu tử | $y_i = x_2$  | $\alpha x_2$ | $y_2 = x_3$  | $x_4$        | $x_5$        |
|--------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| B      | 0,867        | 2,081        | 0,942        | 0,975        | 0,989        |
| T      | 0,125        | 0,125        | 0,057        | 0,025        | 0,011        |
| X      | 0,008        | 0,003        | 0,001        | -            | -            |
|        | <u>1,000</u> | 2,209        | <u>1,000</u> | <u>1,000</u> | <u>1,000</u> |

b)

| Cấu tử | $y_1$        | $x_1$        | $\alpha x_1$ | $y_1$        | $x_2$        | $\alpha x_2$ |
|--------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| B      | 0,808        | 0,687        | 1,649        | 0,850        | 0,757        | 1,817        |
| T      | 0,168        | 0,273        | 0,273        | 0,141        | 0,228        | 0,228        |
| X      | 0,024        | 0,040        | 0,017        | 0,009        | 0,015        | 0,098        |
|        | <u>1,000</u> | <u>1,000</u> | 1,939        | <u>1,000</u> | <u>1,000</u> | 2,143        |

| Cấu tử | $y_2$        | $x_3$        | $\alpha x_3$ | $y_3$        | $x_4$        |
|--------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| B      | 0,848        | 0,754        | 1,810        | 0,899        | 0,838        |
| T      | 0,107        | 0,171        | 0,171        | 0,085        | 0,135        |
| X      | 0,045        | 0,075        | 0,032        | 0,016        | 0,027        |
|        | <u>1,000</u> | <u>1,000</u> | 2,013        | <u>1,000</u> | <u>1,000</u> |

c)

| Cấu tử | $y_1$        | $x_1$        | $\alpha x_1$ | $y_1$        | $x_2$        | $\alpha x_2$ |
|--------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| B      | 0,808        | 0,772        | 1,853        | 0,897        | 0,879        | 2,110        |
| T      | 0,168        | 0,200        | 0,200        | 0,097        | 0,114        | 0,114        |
| X      | 0,024        | 0,028        | 0,012        | 0,006        | 0,007        | 0,003        |
|        | <u>1,000</u> | <u>1,000</u> | 2,065        | <u>1,000</u> | <u>1,000</u> | 2,227        |
| Cấu tử | $y_2$        | $x_3$        | $\alpha x_3$ | $y_3$        | $x_4$        |              |
| B      | 0,947        | 0,939        | 2,254        | 0,974        | 0,971        |              |
| T      | 0,051        | 0,059        | 0,059        | 0,025        | 0,028        |              |
| X      | 0,002        | 0,002        | 0,001        | 0,001        | 0,001        |              |
|        | <u>1,000</u> | <u>1,000</u> | 2,314        | <u>1,000</u> | <u>1,000</u> |              |

d)

|   | $x_1$        | $\alpha x_1$ | $y_1$ | $x_1$        | $\alpha x_1$ | $y_1$        | $x_2$        |
|---|--------------|--------------|-------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| B | 0,10         | 0,24         | 0,24  | 0,146        | 0,350        | 0,307        | 0,222        |
| T | 0,67         | 0,67         | 0,66  | 0,741        | 0,741        | 0,650        | 0,733        |
| X | 0,23         | 0,10         | 0,10  | 0,113        | 0,049        | 0,043        | 0,021        |
|   |              | 1,01         | 1,00  | 1,000        | 1,140        | 1,000        | <u>1,000</u> |
|   | $\alpha x_2$ | $y_2$        | $x_3$ | $\alpha x_3$ | $y_3$        | $x_4$        |              |
| B | 0,533        | 0,415        | 0,343 | 0,823        | 0,560        | 0,056        |              |
| T | 0,730        | 0,569        | 0,639 | 0,639        | 0,435        | 0,488        |              |
| X | 0,021        | 0,016        | 0,018 | 0,008        | 0,005        | 0,006        |              |
|   | 1,284        | 1,000        | 1,000 | 1,470        | 1,000        | <u>1,000</u> |              |

e)

Tương tự như phần d và e, lúc này phương trình đường làm việc dưới được thiết lập như sau:

$$y_{nb} = 0,833x_{n+1} + 0,165$$

$$y_{nt} = 0,833x_{n+1} + 0,0017$$

$$y_{nx} = 0,833x_{n+1}$$

**Bài 1.14**

- a)  $y_{1-3} = 0,778 \times 0,49 + 0,20 = 0,581$   
 $x_{1-3} = 0,36$  (từ đường cong cân bằng lỏng-hơi)
- b)  $y_{1-3} = 0,792$   
 $x_{1-3} = 0,715$

**Bài 1.15**

- a)  $y_{1-2} = 0,8 \times 0,775 + 0,19 = 0,810$   
 $x_{1-2} = 0,645$  (từ đường cong cân bằng)
- b) 8 đĩa khi nguyên liệu được nạp vào tại điểm sôi
- c)  $R_{\min} = 1,53$
- d) 6 đĩa lý thuyết
- e) 8 đĩa lý thuyết

**Bài 1.16**

- a)  $100 = D + W$   
 $100 \times 0,35 = 0,953D + 0,0524W$   
*o*-cresol  
 $100 \times 0,15 = 0,0455 \times 33 + 67x_{w_o}$   
*m*-cresol:  
 $100 \times 0,30 = 0,0015 \times 33 + 67x_{w_m}$   
 các xilenol:  
 $100 \times 0,20 = 0 + 67x_{w_x}$
- b)

| Cấu tử   | $y_i = x_D$ | $y_i/\alpha$ | $x_{i-1}$ | $y_{i-1}$ | $y_{i-1}/\alpha$ | $x_{i-1}$ |
|----------|-------------|--------------|-----------|-----------|------------------|-----------|
| P        | 0,9530      | 0,7620       | 0,941     | 0,943     | 0,754            | 0,928     |
| O        | 0,0455      | 0,0455       | 0,056     | 0,054     | 0,054            | 0,066     |
| M        | 0,0015      | 0,0024       | 0,003     | 0,003     | 0,005            | 0,006     |
| X        | -           | -            | -         | -         | -                | -         |
| $\Sigma$ | 1,0000      | 0,8099       | 1,000     | 1,000     | 0,813            | 1,000     |



c)

|   | $x_s$  | $\alpha x_s$     | $y_s$ | $x_l$ | $\alpha x_l$     | $y_l$ | $x_2$ |
|---|--------|------------------|-------|-------|------------------|-------|-------|
| P | 0,0524 | 0,066            | 0,100 | 0,093 | 0,116            | 0,156 | 0,140 |
| O | 0,2017 | 0,202            | 0,305 | 0,289 | 0,289            | 0,387 | 0,358 |
| M | 0,4472 | 0,282            | 0,427 | 0,430 | 0,271            | 0,363 | 0,376 |
| X | 0,2987 | 0,111            | 0,168 | 0,100 | 0,070            | 0,094 | 0,126 |
|   | 1,000  | $\Sigma = 0,661$ | 1,000 | 1,000 | $\Sigma = 0,746$ | 1,000 | 1,000 |

d)

$$R_m = 1,6$$

**Bài 1.17**a)  $W' = 1,5 \text{ kg/s}$  và  $D' = 1,0 \text{ kg/s}$ 

b) 10 đĩa lý thuyết

Nguyên liệu được nạp vào tại đĩa thứ năm tính từ đỉnh cột

c) Lượng hơi nước cần thiết  $0,95 \text{ kg/s}$ d) Đường kính của cột  $1,67 \text{ m}$ **Bài 1.18**

39 đĩa lý thuyết

**Bài 1.19**

a)

$$\alpha_{PH} = \frac{P_p^0}{P_H^0} = 3,54$$

b)

Số đĩa lý thuyết là 4.

Sử dụng phương trình Fenske  $n=3,07$ 

c)

$$y_{l-1} = 0,67 \times 0,845 + 0,317 = 0,883$$

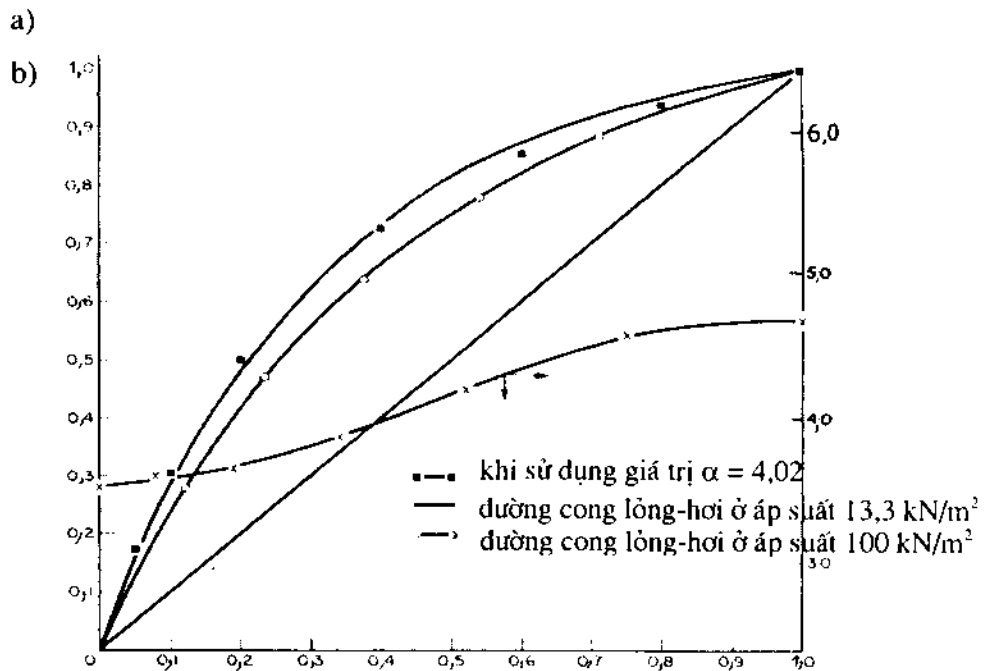
$$x_{l-1} = 0,707 \text{ (từ đường cong cân bằng lỏng-hơi)}$$

$$y_{1-2} = 0,790$$

$$x_{1-2} = 0,56$$

- d) Số đĩa lý thuyết là 6 và vị trí nạp nguyên liệu là đĩa thứ ba tính từ đỉnh cột

### Bài 1.20



- c) Có sự sai lệch khi sử dụng giá trị trung bình
- d) Khi quá trình chưng cất được thực hiện ở áp suất cao hơn thì cũng cần nhiều đĩa lý thuyết hơn ở cùng một yêu cầu tách.

## CHƯƠNG 2: PHƯƠNG PHÁP HẤP THỤ

### Bài 2.1

Số đĩa lý thuyết là 8.

### Bài 2.2

Số đĩa lý thuyết tìm được là 4.

### Bài 2.3

6 đĩa lý thuyết.

### Bài 2.4

Tải trọng cực đại  $X_{\max} = 4,5 \cdot 10^{-4}$

Số đĩa lý thuyết 4

$$\frac{G}{L} = 24,9 \text{ Nm}^3 / \text{m}^3$$

### Bài 2.5

Tải trọng cực đại của nước :  $X_{\max} = 5,3 \cdot 10^{-2}$

Số đĩa lý thuyết cần thiết đối với yêu cầu tách đã cho là 17 đĩa.

$$\frac{L}{G} = \frac{1}{0,04} = 25 \text{ kg} / \text{Nm}^3$$

### Bài 2.6

| Dung môi | $X_{\max}$           | $n_{li}$ | $\text{Nm}^3 / \text{m}^3$ |
|----------|----------------------|----------|----------------------------|
| Nước     | $1,83 \cdot 10^{-4}$ | 29       | 1,03                       |
| Axeton   | $1,43 \cdot 10^{-2}$ | 30       | 80,9                       |
| DMF      | 0,42                 | 22       | 2389,3                     |

**Bài 2.7**

- a) Tải trọng cực đại của etylenglycol đối với yêu cầu tách đề ra là:

$$X_{\max} = 30,9 \times 0,042 = 1,3 \text{ mol hơi nước / mol etylenglycol}$$

- b)  $n_H = 4$

$$L / G = 1 / 5,96 = 0,168 \text{ kg / Nm}^3$$

**Bài 2.8**

-  $X = 0,105 \times 80\% = 0,084$

-  $n_H = 11$

$$\frac{G}{L} = \operatorname{tg} \alpha = 2,9$$

- lượng nước cần 29,4 kg/ h.

### CHƯƠNG 3: PHƯƠNG PHÁP CHIẾT LỎNG-LỎNG

#### Bài 3.1

Số bậc chiết cần thiết là 4.

Bậc chiết thứ nhất  $E_1$  là 3% nước, 32% axetaldehit và 65% S.

$$E_1 = 0,037 \text{ kg/s}$$

#### Bài 3.2

Chiết ngược chiều thành phần của dịch bã là 0,057 kgA/ kgB.

Chiết cùng chiều thành phần của dịch bã là 0,061 kg A/ kg B

#### Bài 3.3

Nồng độ dịch chiết  $y_E = 99,25 \text{ g/kg}$

Số bậc chiết cần thiết để đáp ứng nhiệm vụ tách đề ra là 6.

#### Bài 3.4

- $y_{E\max} = 15 \times 56 = 840 \text{ g/kg}$  hay 0,840 kg phenol/ kg *n*-butyl axetat.

$$\left(\frac{P}{S}\right)_{\max} = \frac{840}{15 - 0,05} = 56,2$$

- Tỷ lệ dung môi là 33,7

Số đĩa lý thuyết là 10

#### Bài 3.5

- Nếu dung môi thứ cấp sử dụng là dietylete:

$$Y_E^{\max} = 2 \times 127 = 254 \text{ g/kg}$$

tỷ lệ dung môi:

$$\frac{m_b}{m_c} = 87,1$$

Lượng dung môi thứ cấp cần thiết là:

$$m_c = \frac{m_b}{87,1} = \frac{3}{87,1} = 0,035 \text{ m}^3 / \text{h}$$

Số bậc chiết lý thuyết cần thiết cho yêu cầu tách là

Nếu dung môi thứ cấp sử dụng là benzen:

$$Y_E^{\max} = 9,75 \text{ g / kg}$$

Tỉ lệ dung môi

$$\frac{m_b}{m_c} = 3,34$$

Lượng dung môi thứ cấp cần thiết là:

$$m_c = \frac{m_b}{3,34} = \frac{3}{3,34} = 0,9 \text{ m}^3 / \text{h}$$

Số bậc chiết lý thuyết cần thiết cho yêu cầu tách là 12.

### Bài 3.6

### Bài 3.7

Nồng độ cực đại của dịch chiết:

$$Y_E^{\max} = 155 \text{ g / kg}$$

Tỉ số dung môi:

$$\frac{m_b}{m_c} = \frac{108,5}{52,63 - 0,5} = 2,1$$

Số bậc chiết lý thuyết cần thiết cho yêu cầu tách nói trên là 11.

### Bài 3.8

$$\text{tg} \alpha = \left( \frac{P}{S} \right)_{\max} = 1,35$$

Tỉ lệ dung môi bằng 80% tỉ lệ dung môi cực đại:

$$\text{tg}\alpha = \left( \frac{P}{S} \right) = 0,8 \times 1,35 = 1,08$$

Nồng độ chiết đạt được là 19,9 % trọng lượng đioxan trong benzen hay 0,248 kg đioxan / kg benzen.

### Bài 3.9

- Hàm lượng nước và clobenzen trong lớp nước lần lượt là: 52,8% và 2,2%.
- Dựa vào đường liên hợp xác định điểm ứng với thành phần lớp clobenzen cân bằng với nó. Điểm này ứng với nồng độ của nước, axeton, clobenzen lần lượt là: 4,3%, 54,9%, 40,8%.

### Bài 3.10

- a) Nồng độ chiết cực đại  $E_{\max}$  chứa 3%  $\text{H}_2\text{O}$ ; 66% benzen; 31% *tert*-butanol.

Lượng dung môi cực tiểu:  $m_s = 0,29 m_F$

b) 
$$\frac{m_s}{m_F} = \frac{MF}{MS} = 0,35$$

Số bậc chiết cần thiết để đáp ứng nhiệm vụ tách đề ra là 5.

## CHƯƠNG 4: TÁCH CHẤT BẰNG PHƯƠNG PHÁP LỌC

### Bài 4.1

- Như vậy tốc độ lọc là  $0,303/120,5 = 0,0025 \text{ m}^3/\text{s}$ .  
Độ dày của lớp bánh lọc là  $0,07/3 = 0,023 \text{ m} = 23 \text{ mm}$
- Thời gian để quay một vòng là  $2,12/0,3 = 7,1 \text{ s}$  và tốc độ quay là  $0,14 \text{ Hz}$  (8,5 vòng/phút)

Tốc độ lọc cực đại là  $0,065 \text{ m}^3$  trong  $7,1 \text{ s}$

$$v_{\max} = (0,065/7,1) = 0,009 \text{ m}^3/\text{s}$$

### Bài 4.2

- Độ dày tối ưu của đĩa là  $106 \text{ mm}$
- Độ dày của khung là  $0,048 \text{ m} = 48 \text{ mm}$ .

### Bài 4.3

Thời gian rửa là  $8400 \text{ s}$  (2,3 h)

### Bài 4.4

- a) Thời gian tổng số cho một vòng là  $2700 + 1200 = 3900 \text{ s}$
- b) Thời gian cho một vòng lọc là  $2100 + 1200 = 3300 \text{ s}$

### Bài 4.5

$$N_2 = 0,12 \text{ Hz} \text{ (7,2 vòng/phút)}$$

### Bài 4.6

Tốc độ tối đa bằng ba lần tốc độ ban đầu, tức là bằng  $18 \text{ kg/s}$ .



**Bài 4.7**

Thời gian cho một vòng mới là  $(180 + 900 + 825 + 2159) = 4064 \text{ s}$

Tốc độ lọc mới là  $0,872\text{V}/4064 = 0,000215\text{V m}^3/\text{s}$

Phần trăm tăng là  $(0,000215 - 0,000196)\text{V} \times 100/0,000196\text{V} = 9,7\%$

**Bài 4.8**

Tốc độ quay là  $1/580 \text{ s} = 0,002 \text{ Hz}$

**Bài 4.9**

Số khung lọc tối thiểu  $n = 13$

**Bài 4.10**

Thời gian toàn bộ một vòng quay là  $26,95/0,4 = 67,3 \text{ s}$

Tốc độ lọc hỗn hợp huyền phù là  $1,66 \times 2,11 = 3,5 \text{ kg/s}$

**Bài 4.11**

Tốc độ lọc là  $0,002 \text{ m}^3/\text{s}$

Diện tích bề mặt của cái lọc trống là  $\pi D^2 = 1,41 \text{ m}^2$ ,  $L = D = 0,67 \text{ m}$

Từ các số liệu thu được từ quá trình lọc thử nghiệm  $v = 0,078 \text{ m}^3/\text{s}$  độ dày của bánh lọc ở cái lọc trống quay bằng  $6,7 \text{ mm}$  là chấp nhận được.

## **PHẦN II**

# **KỸ THUẬT TIẾN HÀNH PHẢN ỨNG HÓA HỌC**

## GIẢI THÍCH CÁC KÝ HIỆU TRONG PHẦN II

|              |                                                                                                                |
|--------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| A,B...       | Chất phản ứng                                                                                                  |
| $C_A$        | Nồng độ của A, mol/l                                                                                           |
| E            | Năng lượng hoạt hoá, J/mol                                                                                     |
| F            | Tốc độ nạp liệu thể tích hoặc khối lượng với nguyên liệu có tỉ trọng thay đổi không đáng kể, l/min hoặc kg/min |
| $F_A$        | Tốc độ nạp liệu của chất A mol/min                                                                             |
| $\Delta G^0$ | Năng lượng tự do tiêu chuẩn                                                                                    |
| H            | Entanpi, J                                                                                                     |
| $\Delta H_R$ | Hiệu ứng nhiệt của phản ứng, J/mol                                                                             |
| $\Delta H_i$ | Hiệu ứng nhiệt của phản ứng tại nhiệt độ T, J/mol                                                              |
| k            | Hằng số tốc độ phản ứng, (mol/l) <sup>1-n</sup> /s                                                             |
| K            | Hằng số cân bằng của phản ứng                                                                                  |
| $M_A$        | Khối lượng phân tử A, ptl                                                                                      |
| n            | Bậc phản ứng                                                                                                   |
| $n_A$        | Số phân tử A/cm <sup>3</sup> , Chương 5                                                                        |
| N            | = 6,023 . 10 <sup>23</sup> phân tử / mol - số Avogadro, Chương 5                                               |
| $N_A$        | Số mol cấu tử A                                                                                                |
| $P_A$        | Áp suất riêng phần cấu tử A                                                                                    |
| $r_A$        | Tốc độ phản ứng, mol A hình thành/(l.s )                                                                       |
| t            | Thời gian, s                                                                                                   |
| T            | Nhiệt độ, K                                                                                                    |
| V            | Thể tích, l                                                                                                    |
|              | Tốc độ dòng, l/min                                                                                             |
| $X_A$        | Độ chuyển hoá của chất A                                                                                       |
| $Z_{AA}$     | Số va chạm A-A/(s.cm <sup>3</sup> )                                                                            |
| [A]          | Nồng độ A, mol/l                                                                                               |
| $\sigma$     | Đường kính phân tử, cm                                                                                         |
| $\tau$       | = $C_{A0}V/F_{A0}$ Thời gian lưu, s                                                                            |
| $\epsilon_A$ | Hệ số thay đổi thể tích                                                                                        |

# CHƯƠNG 5

## ĐỘNG HỌC CỦA PHẢN ỨNG ĐỒNG THỂ

### 5.1. Tốc độ phản ứng đồng thể

Trong phản ứng đồng thể, tất cả các tác nhân phản ứng nằm ở một pha và nếu phản ứng là phản ứng xúc tác thì chất xúc tác cũng cần phải nằm trong một pha với các tác nhân phản ứng.

Đối với phản ứng đồng thể, tốc độ tạo thành chất A được định nghĩa:

$$r_A = \frac{1}{V} \frac{dN_A}{dt} = \frac{\text{Số mol chất A hình thành trong quá trình phản ứng}}{(\text{Đơn vị thể tích}) \times (\text{Đơn vị thời gian})}$$

Các yếu tố ảnh hưởng đến tốc độ của phản ứng đồng thể là thành phần, nhiệt độ và áp suất:  $r_A = f(T, P, C)$

### 5.2. Phân loại các phản ứng đồng thể

#### 5.2.1. Phản ứng đơn giản và phức tạp

- ♦ Phản ứng đơn giản gồm một phương trình tỉ lượng và một phương trình biểu diễn tốc độ phản ứng.
- ♦ Phản ứng phức tạp được biểu diễn bằng một số phương trình tỉ lượng và một số phương trình biểu diễn sự thay đổi nồng độ của các tác nhân phản ứng.

Phản ứng phức tạp bao gồm:

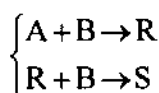
- Phản ứng nối tiếp:



- Phản ứng song song:

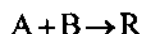


Phản ứng hỗn hợp:



### 5.2.2. Phản ứng cơ bản và không cơ bản

Xem xét một phản ứng đơn giản với phương trình tỉ lượng như sau:

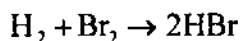


- ♦ Phản ứng trên được gọi là phản ứng cơ bản, phương trình tốc độ phản ứng có thể suy ra từ phương trình tỉ lượng:

$$r_R = -r_A = -r_B = kC_A C_B$$

- ♦ Phản ứng không cơ bản không có mối quan hệ tương ứng giữa phương trình tỉ lượng và phương trình tốc độ.

#### Ví dụ 5.1



Có phương trình biểu diễn tốc độ của phản ứng như sau:

$$r_{HBr} = \frac{k_1 [H_2] [Br]^{1/2}}{k_2 + [HBr]} Br_2$$

- ❖ Phản ứng không cơ bản là tổ hợp của một loạt các phản ứng cơ bản.

### 5.3. Quan điểm động học về cân bằng của các phản ứng cơ bản

Xét các phản ứng cơ bản thuận nghịch:  $A + B \rightleftharpoons R + S$   $K_C, K_P$

Tốc độ tạo thành R theo phản ứng thuận như sau:

$$r_{R,l} = k_1 C_A C_B$$

Tốc độ biến mất R trong phản ứng nghịch được xác định như sau:

$$-r_{R,n} = k_2 C_R C_S$$

Tại trạng thái cân bằng thành phần của R trong hỗn hợp phản ứng là không thay đổi nên:

$$\frac{k_1}{k_2} = \frac{C_R C_S}{C_A C_B}$$

Mặt khác, hằng số cân bằng  $K_C$  được định nghĩa:  $K_C = \frac{k_1}{k_2}$

Như vậy, tại điều kiện cân bằng và chỉ tại điều kiện cân bằng thì:

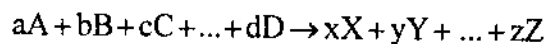
$$K_C = \frac{k_1}{k_2} = \left[ \frac{C_R C_S}{C_A C_B} \right]_{cb}$$

Đối với các phản ứng không cơ bản chúng ta không thể có mối liên hệ giữa phương trình tỉ lượng và phương trình tốc độ của phản ứng.

### \* Phân tử số và bậc của phản ứng

Phân tử số của một phản ứng cơ bản là số phân tử tham gia vào phản ứng cơ bản, người ta tìm thấy được các phản ứng cơ bản có phân tử số là một, hai và ba. Lưu ý rằng phân tử số chỉ đề cập đến các phản ứng cơ bản.

Đối với phản ứng:



$$-r_A = C_A^a C_B^b C_C^c \dots C_D^d$$

Bậc của phản ứng  $n = a + b + c + \dots + d$

### \* Hằng số tốc độ của phản ứng k

Khi biểu thức tốc độ phản ứng của một phản ứng hoá học đồng thể là:

$$-r_A = C_A^a C_B^b C_C^c \dots C_D^d$$

$$n = a + b + c + \dots + d$$

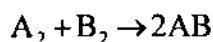
Thứ nguyên của hằng số tốc độ  $k$  đối với phản ứng có bậc  $n$  trên là:

$$(\text{thời gian})^{-1}(\text{nồng độ})^{1-n}$$

#### 5.4. Các mô hình động học đối với các phản ứng không cơ bản

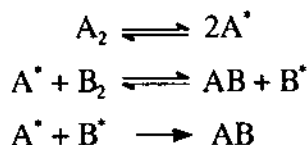
Để giải thích động học của phản ứng không cơ bản, giả sử rằng phản ứng không cơ bản là tổ hợp của một số phản ứng cơ bản nhưng không thể đo hoặc quan sát thấy sự tạo thành các hợp chất trung gian bởi vì chúng chỉ tồn tại trong quãng thời gian rất ngắn. Do đó, chỉ nhận ra các tác nhân phản ứng ban đầu và sản phẩm phản ứng.

Ví dụ:



là một phản ứng không cơ bản.

Giả sử phản ứng không cơ bản gồm một số các phản ứng cơ bản như sau:

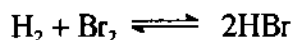


Để kiểm tra cơ chế đề ra, xét phương trình động học nhận được mô hình phản ứng đó có tương ứng với phương trình động học nhận được bằng thực nghiệm hay không.

##### Ví dụ 5.2

- Phản ứng liên tục theo cơ chế gốc tự do

Tìm mô hình động học cho phản ứng:

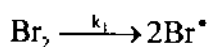


Biểu thức xác định vận tốc của phản ứng suy ra từ thực nghiệm như sau:

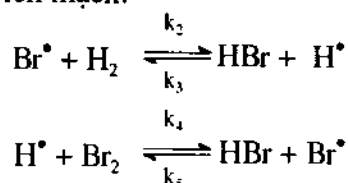
$$r_{HBr} = \frac{k_1 [H_2] [Br_2]^{1/2}}{k_2 + [Br_2]}$$

Mô hình động học đề nghị của phản ứng:

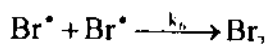
- ✓ Phản ứng khơi mào:



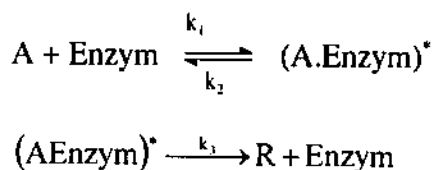
- ✓ Giai đoạn phát triển mạch:



- ✓ Giai đoạn ngắt mạch:



- Phức chất hoạt động trung gian dạng phân tử, đặc trưng là các phản ứng xúc tác enzym



### \* Tìm mô hình động học cho phản ứng

Để tìm được mô hình phản ứng phù hợp, biểu thức tốc độ phản ứng thu được từ thực nghiệm cần dựa trên hai giả thuyết:

- 1) Nếu cấu tử  $i$  tham gia vào một số phản ứng cơ bản thì tốc độ thay đổi nồng độ cấu tử  $i$  là tổng các tốc độ thay đổi nồng độ của  $i$  trong các phản ứng cơ bản:

$$R_i = \sum r_i$$

- 2) Vì chất hoạt động trung gian có mặt với lượng nhỏ đến nỗi tốc độ thay đổi nồng độ của chúng trong hệ thống sau một thời gian rất ngắn có thể không lớn, do đó với sai số không đáng kể tốc độ này được xem như bằng 0. Đây được gọi là giả thuyết trạng thái dừng.

### Ví dụ 5.3

Tìm mô hình động học cho phản ứng:  $2\text{A} + \text{B} \rightarrow \text{A}_2\text{B}$



Biết biểu thức xác định tốc độ phản ứng như sau:

$$r_{A_2B} = \frac{0,72C_A^2 C_B}{1 + 2C_A}$$

Cơ chế nào của phản ứng là phù hợp với phương trình tốc độ của phản ứng nếu như về mặt hoá học phản ứng chỉ ra rằng hợp chất trung gian chứa một tổ hợp các phân tử phản ứng và không xảy ra phản ứng liên tục?

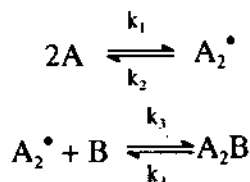
Lời giải

Nếu đây là phản ứng đơn giản thì:

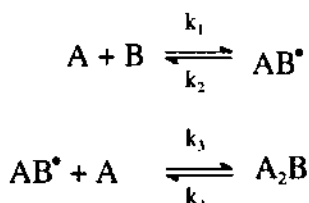
$$r_{A_2B} = k[A]^2 [B]$$

Như vậy đây không phải là phản ứng cơ bản.

- Mô hình 1



- Mô hình 2



- ✓ Xét mô hình 1

Ta có:  $r_{A_2B} = k_3[A_2^\bullet][B] - k_4[A_2B]$

$$r_{A_2} = (1/2)k_1[A]^2 - k_2[A_2^\bullet] - k_3[A_2^\bullet][B] + k_4[A_2B]$$

$$r_{A_2} = 0$$

$$[A_2^\bullet] = \frac{(1/2)k_1[A]^2 + k_4[A_2B]}{k_2 + k_3[B]}$$

Thay kết quả trên vào phương trình tốc độ của sản phẩm phản ứng ta có:

$$r_{A_2B} = \frac{1}{2} \frac{k_1 k_3 [A]^2 [B] - k_2 k_4 [A_2B]}{k_2 + k_3 [B]}$$

Nếu  $k_2$  rất nhỏ

$$r_{A_2B} = \frac{1}{2} k_1 [A]^2$$

Như vậy mô hình này không hợp lý.

✓ Xét mô hình 2

Ta có:

$$r_{A_2B} = k_3 [AB^*][A] - k_4 [A_2B]$$

$$r_{A_2B^*} = k_2 [A][B] - k_2 [AB^*] - k_3 [AB^*][A] + k_4 [A_2B]$$

$$r_{A_2B^*} = 0 \Rightarrow [AB^*] = \frac{k_1 [A][B] + k_4 [A_2B]}{k_2 + k_3 [A]}$$

Thay kết quả trên vào phương trình tốc độ của sản phẩm phản ứng ta có:

$$r_{A_2B} = \frac{k_1 k_3 [A]^2 [B] + k_2 k_4 [A_2B]}{k_2 + k_3 [A]}$$

Nếu  $k_4$  rất nhỏ:

$$r_{A_2B} = \frac{k_1 k_3 [A]^2 [B]}{k_2 + k_3 [A]}$$

Như vậy, cơ chế phản ứng đề xuất ở mô hình 2 là phù hợp.

## 5.5. Ảnh hưởng của nhiệt độ đến tốc độ phản ứng

### 5.5.1. Định luật Arrhenius về sự ảnh hưởng của nhiệt độ đến tốc độ phản ứng

Đối với nhiều phản ứng và đặc biệt là các phản ứng đơn giản thì tốc độ phản ứng có thể được viết :

$$r_i = f_1(T) \times f_2(C)$$

$$r_i = k f_2(C)$$

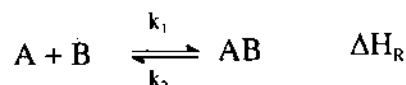
Đối với các phản ứng này phần phụ thuộc nhiệt độ được gọi là hằng số tốc độ phản ứng và theo định luật Arrhenius thì:

$$k = k_0 e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

trong đó : E - năng lượng hoạt hoá của phản ứng.

### 5.5.2. Ảnh hưởng của nhiệt độ đến tốc độ phản ứng theo quan điểm nhiệt động học

Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của hằng số cân bằng của các phản ứng thuận nghịch cơ bản. Ví dụ phản ứng



được biểu diễn bằng phương trình Van't Hoff :

$$\frac{d(\ln K)}{dT} = \frac{\Delta H_R}{RT^2}$$

Mặt khác:

$$K = \frac{[AB]}{[A][B]} = \frac{k_1}{k_2}$$

Suy ra:

$$\frac{d(\ln k_1)}{dT} = \frac{d(\ln k_2)}{dT} = \frac{\Delta H_R}{RT^2}$$

$$\frac{d(\ln k_1)}{dT} = \frac{E_1}{RT^2}$$

$$\frac{d(\ln k_2)}{dT} = \frac{E_2}{RT^2}$$

Trong khoảng nhiệt độ đủ nhỏ xem  $E_1$  và  $E_2$  không phụ thuộc vào nhiệt độ, lấy tích phân phương trình trên thu được phương trình Arrhenius.

### 5.5.3. Ảnh hưởng của nhiệt độ đến tốc độ phản ứng theo thuyết va chạm

Số va chạm của các phân tử ở pha khí có thể được tính từ thuyết động học chất khí.

- ♦ Đối với các va chạm của các phân tử A giống nhau:

$$Z_{AA} = \sigma_A^2 n_A^2 \sqrt{\frac{4\pi kT}{M_A}} = \sigma_A^2 \frac{N^2}{10^6} \sqrt{\frac{4\pi kT}{M_A}} \times C_A^2 \quad (\text{Số va chạm A} - \text{A/s cm}^3)$$

trong đó:

$\sigma$ : đường kính phân tử (cm);

M: khối lượng phân tử (ptl);

N:  $6,023 \cdot 10^{23}$  phân tử/mol - số Avogadro;

$C_A$ : nồng độ A (mol/l);

$n_A = NC_A/10^3$ , số phân tử A/cm<sup>3</sup>;

$k = R/N = 1,38 \cdot 10^{-16}$  erg/K - hằng số Boltzmann.

- ♦ Đối với các va chạm của các phân tử không giống nhau trong hỗn hợp A và B:

$$Z_{AB} = \left( \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2} \right)^2 n_A n_B \sqrt{8\pi kT \left( \frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)}$$

$$Z_{AB} = \left( \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2} \right)^2 \frac{N^2}{10^6} \sqrt{8\pi kT \left( \frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)} \times C_A C_B$$

Nếu như mỗi va chạm của các phân tử phản ứng dẫn đến sự chuyển các chất tham gia phản ứng thành sản phẩm thì các phương trình trên sẽ biểu diễn tốc độ của phản ứng lưỡng phân tử. Tuy nhiên, tốc độ thực thông thường nhỏ hơn nhiều so với điều dự đoán và điều đó chỉ ra rằng chỉ một phần nhỏ của số va chạm giữa các phân tử là dẫn đến phản ứng. Nói một cách chính xác hơn là chỉ có những va chạm có năng lượng lớn hơn năng lượng hoạt hóa của phản ứng mới dẫn đến phản ứng.

Phương trình xác định tốc độ phản ứng:

$$-r_A = \frac{1}{V} \times \frac{dN_A}{dt} = k C_A C_B$$

({tốc độ va chạm (mol/l.s)}  $\times$  {phần va chạm có hiệu quả})

$$-r_A = Z_{AB} \times \frac{1000}{N} \times e^{-E/RT}$$

$$-r_A = \left( \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2} \right) \frac{N}{10^3} \sqrt{8\pi kT \left( \frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)} \times e^{-E/RT} \times C_A C_B$$

Trong cả hai trường hợp thì:

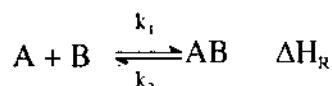
$$k \sim T^{1/2} e^{-E/RT}$$

#### 5.5.4. Ảnh hưởng của nhiệt độ đến tốc độ phản ứng theo thuyết trạng thái chuyển tiếp

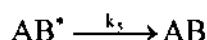
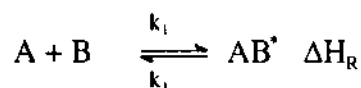
Thuyết trạng thái chuyển tiếp mô tả các chất phản ứng liên kết hợp với nhau tạo thành các hợp chất trung gian không bền được gọi là các phức hoạt động và tiếp đó các phức này phân hủy tạo thành sản phẩm. Ngoài ra, thuyết này còn cho rằng cân bằng tồn tại giữa các chất phản ứng và các phức hoạt động tồn tại tại mọi thời điểm và tốc độ phân hủy của phức là như nhau đối với tất cả các phản ứng và bằng  $kT/h$  với  $k$  là hằng số Boltzmann và  $h = 6,63 \cdot 10^{-27}$  erg.s là hằng số Planck.

##### Ví dụ 5.4

- Đối với phản ứng cơ bản theo chiều thuận của phản ứng thuận nghịch:



Giả sử phản ứng theo cơ chế:



Suy ra:

$$K_c = \frac{k_1}{k_2} = \frac{[AB^*]}{[A][B]}$$

$$[AB^*] = K_c \cdot [A][B]$$

$$k_2 = \frac{kT}{h}$$

Tốc độ của phản ứng:  $r_{AB} = (\text{nồng độ của phức hoạt động}) \times (\text{tốc độ phản ứng của phức hoạt động})$

$$r_{AB} = \frac{kT}{h} \times [AB^*] = \frac{kT}{h} \times K_c \times C_A C_B$$

Biểu diễn hằng số cân bằng của phức hoạt động qua năng lượng tự do tiêu chuẩn:

$$\Delta G^* = \Delta H^* - T\Delta S^* = -RT \ln \left[ \frac{K_{C^*}}{K_{C^*}^0} \right]$$

$$K_{C^*} = e^{\frac{-\Delta G^*}{RT}} = e^{\frac{-\Delta H^*}{RT} + \frac{\Delta S^*}{R}}$$

Suy ra:

$$r_{AB} = \frac{kT}{h} \times e^{\frac{\Delta S^*}{R}} \times C_A C_B$$

Xét quan hệ giữa  $\Delta H^*$  và năng lượng hoạt hóa E:

- Đối với chất lỏng và rắn:

$$E = \Delta H^* - RT$$

- Đối với chất khí thì :

$$E = \Delta H^* - (\text{phân tử số} - 1)RT$$

Với cách xác định này sự khác nhau giữa E và  $\Delta H^*$  là nhỏ. Do đó có thể xem gần đúng là:

$$k \sim T \cdot e^{-E/RT}$$

### \* Xét sự khác nhau giữa thuyết va chạm và thuyết trạng thái chuyển tiếp

- Thuyết va chạm cho rằng A và B va chạm với nhau tạo thành hợp chất trung gian không bền sau đó phân hủy thành sản phẩm:



Theo thuyết va chạm thì tốc độ được quyết định bởi số va chạm hữu ích giữa các chất phản ứng và coi phức trung gian phân hủy đủ nhanh đến mức không ảnh hưởng đến tốc độ chung của quá trình.

- Thuyết trạng thái chuyển tiếp xem tốc độ phản ứng được quyết định bởi tốc độ phân hủy hợp chất trung gian. Tốc độ tạo thành hợp chất trung gian được xem là nhanh đến mức tồn tại cân bằng trong suốt thời gian phản ứng. Nó được tạo thành bằng cách nào thì không cần xem xét.

Như vậy, thuyết va chạm cho rằng bước đầu của phản ứng trên là va chạm và là bước quyết định tốc độ phản ứng, còn thuyết trạng thái chuyển tiếp xem bước thứ hai là yếu tố quyết định tốc độ phản ứng. Hai thuyết này bổ sung cho nhau.

**\* So sánh các lý thuyết với định luật Arrhenius**

$$k \sim T^m \cdot e^{-E/RT} \quad (0 \leq m \leq 1)$$

$$k = k'_0 \cdot T^m \cdot e^{-E/RT}$$

Vì hàm mũ là nhạy cảm đối với sự thay đổi nhiệt độ hơn nhiều so với  $T^m$  nên sự thay đổi của  $k$  gây ra bởi thừa số hàm mũ là chủ yếu, do đó:

$$k \sim e^{-E/RT} = k_0 \cdot e^{-E/RT}$$

Mặt khác, nếu lấy logarit phương trình trên rồi lấy vi phân theo  $T$  sẽ tìm được thay đổi của  $k$  theo nhiệt độ:

$$\frac{d(\ln k)}{dT} = \frac{m}{T} + \frac{E}{RT^2} = \frac{mRT + E}{RT^2}$$

Vì  $mRT \ll E$  đối với hầu hết các phản ứng đã nghiên cứu nên ta có thể bỏ qua  $mRT$  và có thể viết:

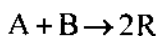
$$\frac{d(\ln k)}{dT} = \frac{E}{RT^2}$$

$$k \sim e^{-E/RT}$$

## BÀI TẬP CHƯƠNG 5

### Bài 5.1

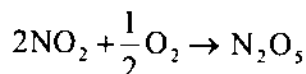
Một phản ứng có phương trình tỉ lệ:



Phản ứng này tuân theo quy luật động học của phản ứng bậc mấy?

### Bài 5.2

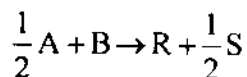
Cho phản ứng



Tìm mối quan hệ giữa tốc độ hình thành của chất tạo thành và tốc độ mất đi của chất tham gia phản ứng

### Bài 5.3

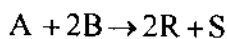
Một phản ứng có phương trình tỉ lệ:



Có phương trình biểu diễn tốc độ phản ứng như sau:

$$-r_A = 2C_A^{0.5} C_B$$

Phương trình biểu diễn tốc độ phản ứng sẽ như thế nào nếu như phương trình tỉ lệ của phản ứng được viết:



### Bài 5.4

Trong một phản ứng, tốc độ phản ứng được xác định như sau:

$$-r_A = 0,005C_A^2 \quad ((\text{mol}/\text{cm}^3 \text{ phút}))$$



Nếu nồng độ được biểu diễn bằng đơn vị mol/lit và thời gian được tính theo đơn vị là giờ thì giá trị của hằng số tốc độ phản ứng theo các đơn vị đó sẽ là bao nhiêu?

### **Bài 5.5**

Đối với các phản ứng trong pha khí ở nhiệt độ 400°C tốc độ phản ứng được xác định như sau:

$$-\frac{dP_A}{dt} = 3,66P_A^2 \quad (\text{atm giờ})$$

- Xác định đơn vị biểu diễn hằng số tốc độ phản ứng của phản ứng này?
- Tính giá trị của hằng số tốc độ phản ứng nếu phương trình tốc độ của phản ứng này được biểu diễn như sau:

$$-r_A = -\frac{1}{V} \frac{dN_A}{dt} = kC_A^2 \quad (\text{mol/l} \times \text{giờ})$$

### **Bài 5.6**

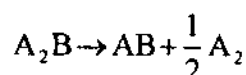
Thí nghiệm chỉ ra rằng phản ứng đồng thể phân hủy ozon có biểu thức xác định tốc độ phản ứng như sau:

$$-r_{O_3} = k[O_3]^2[O_2]^{-1}$$

- Bậc của phản ứng?
- Đưa ra một cơ chế phản ứng gồm hai bước để giải thích biểu thức tốc độ phản ứng này và cách tiến hành thực nghiệm để xác định cơ chế này.

### **Bài 5.7**

$A_2B$  phân hủy theo phương trình tỉ lượng:

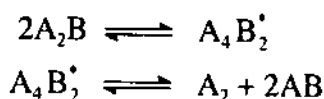


Các nhà khoa học đã mất rất nhiều công sức nhưng vẫn chưa tìm ra được động học của phản ứng, không tìm được phương trình tốc độ nào phù hợp với số liệu động học thu được. Tuy nhiên, có thể rút ra các kết luận sau đây từ các số liệu động học quan sát được:

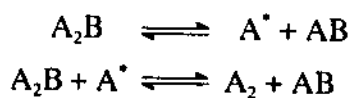
- Khi bắt đầu phản ứng thì phản ứng là bậc 1 theo chất phản ứng.
- Khi chất phản ứng gần hết, dữ liệu thu được phù hợp với phản ứng bậc hai theo chất phản ứng.
- Đưa AB từ sản phẩm vào dòng nguyên liệu thì tốc độ phản ứng không thay đổi.
- Đưa A<sub>2</sub> từ sản phẩm vào dòng nguyên liệu thì tốc độ phản ứng giảm đi, tuy nhiên không tìm được mối quan hệ giữa lượng A<sub>2</sub> thêm vào và sự thay đổi về tốc độ.

Người ta hy vọng từ lý thuyết có thể suy ra được biểu thức tính tốc độ phản ứng phù hợp, các cơ chế sau đây đã được xem xét:

Cơ chế I:



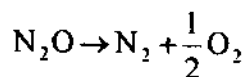
Cơ chế II:



- Hai cơ chế đưa ra có phù hợp với thực nghiệm hay không? Nếu có một cơ chế không phù hợp, hãy đưa ra lý do giải thích.
- Nếu cả hai cơ chế đưa ra không phù hợp với thực nghiệm, hãy đưa ra một cơ chế phản ứng phù hợp với các số liệu thực nghiệm tìm được.

### Bài 5.8

Phản ứng phân hủy đinitơ oxit:



Biểu thức tính vận tốc của phản ứng tìm được như sau:

$$-r_{N_2O} = \frac{k_1[N_2O]^2}{1 + k_2[N_2O]}$$

Hãy đưa ra một cơ chế phản ứng để giải thích cho biểu thức tính vận tốc tìm được ở trên.

**Bài 5.9**

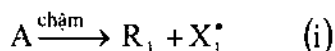
Phản ứng nhiệt phân etan có năng lượng hoạt hóa khoảng 75.000 cal. Tốc độ phản ứng khi tiến hành ở nhiệt độ 650°C sẽ tăng so với tốc độ phản ứng tiến hành ở 500°C là bao nhiêu lần?

**Bài 5.10**

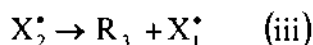
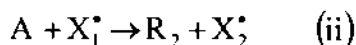
Quá trình nhiệt phân các hydrocarbon thường có bậc phản ứng động học  $n = 0,5; 1; 1,5; \dots$  và đặc điểm này có thể giải thích theo cơ chế phản ứng dây chuyền gốc tự do, cách này đã được Rice và Herzfeld đề nghị lần đầu tiên vào năm 1934.

Ví dụ: Giả sử hydrocarbon A phân hủy cho sản phẩm là các phân tử  $R_1, R_2, \dots$  trong khi đó  $X_1^\bullet$  và  $X_2^\bullet$  là các hợp chất trung gian gốc tự do.

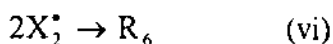
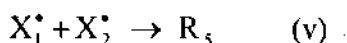
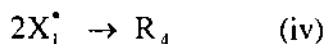
Sự tạo thành gốc tự do:



Các bước phát triển mạch thường lặp lại nhiều lần:



Quá trình ngắt mạch là quá trình triệt tiêu gốc tự do:

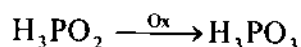


Sử dụng các bước khơi mào và phát triển mạch (i), (ii), và (iii), hãy xác định bậc của phản ứng phân hủy chất A khi bước ngắt mạch là:

- Bước (iv)
- Bước (v)
- Bước (vi)

**Bài 5.11**

Dưới sự ảnh hưởng của tác nhân oxi hóa, axit hypophosphorơ chuyển thành axit photphorơ



- Khi nồng độ tác nhân oxi hóa thấp:

$$r_{\text{H}_3\text{PO}_3} = k[\text{Ox}][\text{H}_3\text{PO}_2]$$

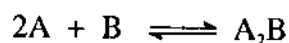
- Khi nồng độ tác nhân oxi hóa cao:

$$r_{\text{H}_3\text{PO}_3} = k'[\text{H}^+][\text{H}_3\text{PO}_2]$$

Để giải thích cơ chế động học quan sát được người ta giả thiết rằng ion  $\text{H}^+$  đóng vai trò như một xúc tác, thông thường thì  $\text{H}_3\text{PO}_2$  kém hoạt động được chuyển thành  $\text{H}_3\text{PO}_3$  hoạt động, bản chất của quá trình này vẫn chưa được biết rõ. Chất hoạt động trung gian phản ứng với tác nhân oxi hóa cho  $\text{H}_3\text{PO}_3$ . Hãy đưa ra mô hình phản ứng để giải thích cho cơ chế động học của phản ứng.

**Bài 5.12**

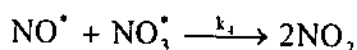
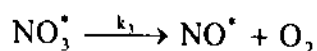
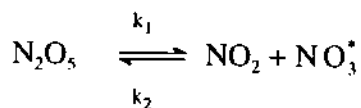
Hãy đề xuất cơ chế phù hợp với phương trình động học về tốc độ phản ứng đã được tìm ra bằng thực nghiệm đối với phản ứng sau:



$$r_{\text{A}_2\text{B}} = k.[\text{A}][\text{B}]$$

**Bài 5.13**

Chúng ta rằng cơ chế phản ứng được Ogg (1947) đề nghị sau đây:



là phù hợp với cơ chế phản ứng quan sát được là bậc một đối với quá trình phân hủy  $\text{N}_2\text{O}_5$ .

**Bài 5.14**

Tìm mô hình động học cho phản ứng:



Biết rằng biểu thức xác định vận tốc của phản ứng suy ra từ thực nghiệm như sau:

$$r_{\text{HBr}} = \frac{k_1 [\text{H}_2] [\text{Br}_2]^{1/2}}{k_2 + \frac{[\text{HBr}]}{[\text{Br}_2]}}$$

**Bài 5.15**

Các phản ứng có xúc tác enzym. Một chất phản ứng chuyển thành sản phẩm nhờ xúc tác của một enzym, phân tử có phân tử lượng cao ( $m.w > 10.000$ ) kiểu như các phân tử protein. Xúc tác enzym có tính chọn lọc rất cao, phản ứng xúc tác chỉ là một phản ứng hoặc một nhóm phản ứng đặc biệt.



Các phản ứng loại này có các đặc trưng về tốc độ phản ứng như sau:

- Tốc độ phản ứng tỉ lệ với nồng độ của enzym có trong hỗn hợp phản ứng  $[\text{E}_0]$ .
- Ở nồng độ chất phản ứng thấp, tốc độ phản ứng tỉ lệ với nồng độ chất phản ứng.
- Ở nồng độ chất phản ứng cao, tốc độ phản ứng đạt đến mức không phụ thuộc vào nồng độ chất phản ứng.

Michaelis và Menten (1913) đã đưa ra giải thích về đặc tính chung của loại phản ứng loại này bằng cơ chế sau:



Điểm đặc biệt của mô hình này là nồng độ của hợp chất trung gian là phù hợp, trong trường hợp đó lượng enzym tổng được phân bố như sau:

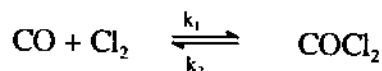
$$[\text{E}_0] = [\text{E}] + [(\text{A.E})^*]$$

Vì vậy nồng độ của enzym không thể thay đổi một cách dễ dàng, việc thay đổi tốc độ phản ứng theo nồng độ của enzym  $[E_0]$  và nồng độ chất phản ứng  $[A]$ .

Hãy giải thích cho đặc điểm quan sát được.

### **Bài 5.16**

Sự tạo thành và phân hủy photgen được xác định như sau:

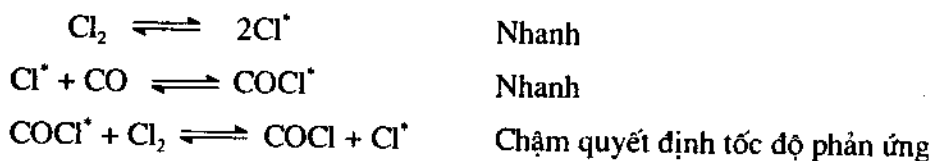


Tốc độ phản ứng theo chiều thuận:

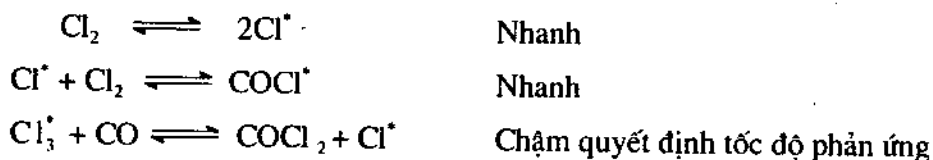
$$r_{\text{COCl}_2} = k_1 [\text{Cl}_2]^{3/2} [\text{CO}]$$

- Các biểu thức tính tốc độ phản ứng có phù hợp về mặt nhiệt động học hay không?
- Các cơ chế tìm được sau đây có phù hợp với biểu thức tính tốc độ phản ứng tìm được bằng thực nghiệm hay không?

Cơ chế I:



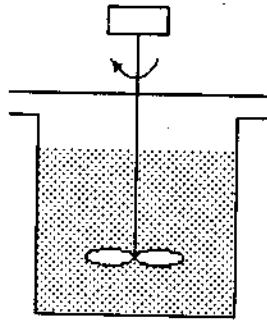
Cơ chế II:



## CHƯƠNG 6

### CÁC THIẾT BỊ PHẢN ỨNG LÝ TƯỞNG ĐƠN GIẢN

#### 6.1. Thiết bị phản ứng khuấy lý tưởng gián đoạn (Batch reactor - BR)



Hình 6.1: Thiết bị phản ứng khuấy lý tưởng gián đoạn.

Khi tiến hành phản ứng trong thiết bị khuấy lý tưởng đơn giản thì các chất tham gia phản ứng được đưa vào bình phản ứng, được khuấy trộn đều. Sau thời gian phản ứng, các chất phản ứng được lấy ra. Như vậy, thành phần của hỗn hợp phản ứng thay đổi theo thời gian nhưng tại bất cứ điểm nào của thiết bị thì thành phần của hỗn hợp phản ứng là như nhau.

Thiết lập phương trình cân bằng vật chất trong thiết bị phản ứng khuấy lý tưởng gián đoạn:

$$\text{Lượng chất A đi vào thiết bị phản ứng} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Lượng chất A mất đi trong phản ứng} \\ \text{Lượng chất A đi ra khỏi thiết bị phản ứng} \\ \text{Lượng chất A tích lũy trong thiết bị phản ứng} \end{array} \right. \quad (6.1)$$

Như vậy:

(Tốc độ phản ứng của chất A) = -(Tốc độ tích lũy trong thiết bị phản ứng của chất A)

- Số mol chất A tham gia phản ứng trong một đơn vị thời gian được tính:

$$(-r_A)V = \frac{\text{Số mol chất A phản ứng}}{(\text{Thời gian phản ứng})(\text{thể tích hỗn hợp phản ứng})} \quad (\text{Thể tích thiết bị phản ứng}) \quad (6.2)$$

Số mol chất A tích lũy trong thiết bị phản ứng trong một đơn vị thời gian được tính:

$$\frac{dN_A}{dt} = \frac{d[N_{A0}(1-X_A)]}{dt} = -N_{A0} \frac{dX_A}{dt} \quad (6.3)$$

trong đó :  $N_A$  : số mol hiện có;

$N_{A0}$ : số mol ban đầu;

$X_A$  : độ chuyển hóa;

$V$  : thể tích hỗn hợp phản ứng .

Thay các phương trình (6.2) và (6.3) và phương trình (6.1) nhận được:

$$(-r_A)V = N_{A0} \frac{dX_A}{dt} \quad (6.4)$$

Biến đổi phương trình (6.4) rồi lấy tích phân nhận được:

$$t = N_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)V} \quad (6.5)$$

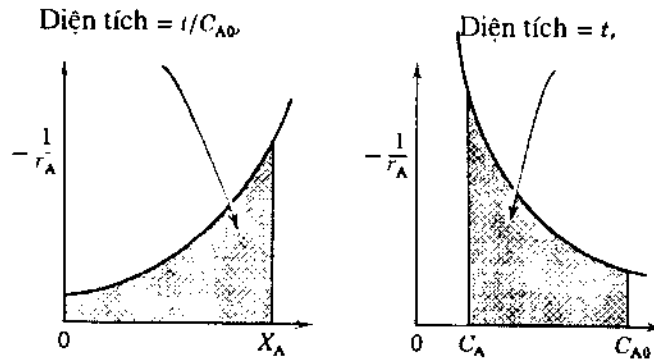
Khi thể tích của hỗn hợp phản ứng không thay đổi suy ra:



$$t = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} = - \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{(-r_A)} \quad (6.6)$$

Phương trình (6.6) là phương trình dùng để tính thời gian lưu đối với thiết bị phản ứng khuấy lý tưởng liên tục.

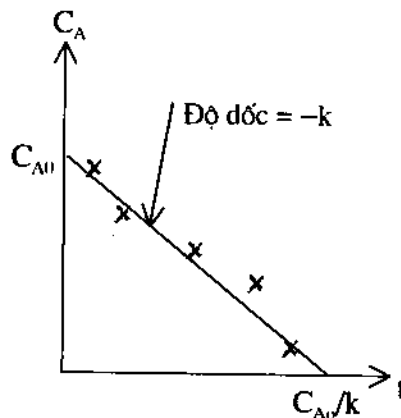
Dạng đồ thị của phương trình (6.6) được biểu diễn trong hình 6.2



**Hình 6.2:** Đồ thị biểu diễn mối quan hệ giữa nghịch đảo tốc độ phản ứng và độ chuyển hóa/nồng độ chất tham gia phản ứng.

✓ Phản ứng bậc không:  $A \rightarrow$  sản phẩm,  $(-r_A) = k$

$$t = \frac{C_{A0} - C_A}{k} \quad (6.6.0)$$



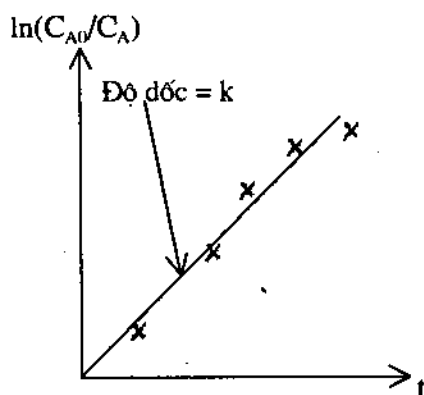
✓ Phản ứng bậc 1:

– Phản ứng bất thuận nghịch bậc 1:  $A \rightarrow \text{sản phẩm}$ ,  $(-r_A) = kC_A$

$$t = \frac{1}{k} \ln \frac{C_{A0}}{C_A} = \frac{1}{k} \ln \frac{1}{1-X_A} \quad (6.6.1a)$$

$$\Rightarrow \frac{C_A}{C_{A0}} = e^{-kt}$$

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$$



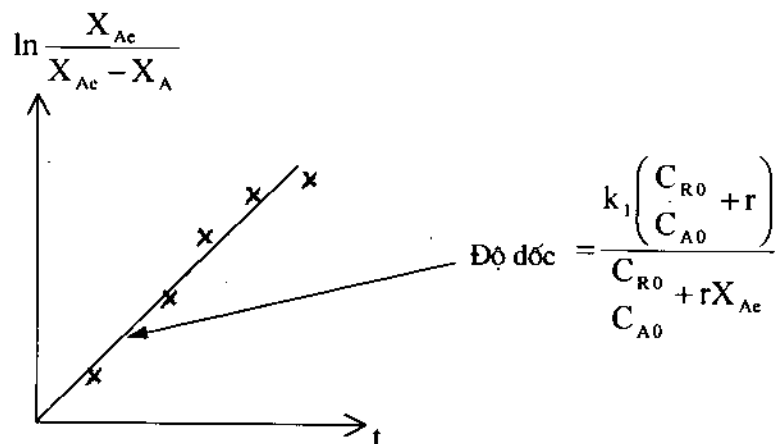
– Phản ứng thuận nghịch bậc 1:  $A \rightleftharpoons R$ ,  $(-r_A) = k_1C_A - k_2C_R$

Biểu diễn  $k_2$ ,  $C_R$  theo  $C_{A0}$ ,  $C_{Ac}$ ,  $C_{R0}$  lấy tích phân phương trình tốc độ phản ứng ta có:

$$t = \frac{1}{k_1} \frac{\frac{C_{R0}}{C_{A0}} + r \left( 1 - \frac{C_{Ac}}{C_{A0}} \right)}{\frac{C_{R0}}{C_{A0}} + r} \ln \frac{C_{A0} - C_{Ac}}{C_A - C_{Ac}}$$

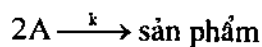
$$t = \frac{1}{k_1} \frac{\frac{C_{R0}}{C_{A0}} + rX_{Ac}}{\frac{C_{R0}}{C_{A0}} + r} \ln \frac{X_{Ac}}{X_{Ac} - X_A} \quad (6.6.1b)$$

trong đó :  $C_{Ac}$ ,  $X_{Ac}$  lần lượt là nồng độ và độ chuyển hóa của chất A tại trạng thái cân bằng.



✓ Phản ứng bậc 2:

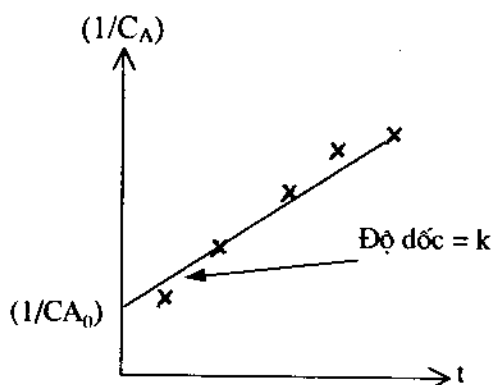
– Phản ứng bất thuận nghịch bậc 2:

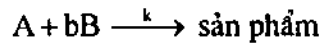


$$(-r_A) = kC_A^2$$

$$t = \frac{1}{kC_{A0}} \left( \frac{C_{A0}}{C_A} - 1 \right) = \frac{1}{kC_{A0}} \frac{X_A}{1 - X_A}$$

$$\Rightarrow \frac{C_A}{C_{A0}} = \frac{1}{kC_{A0}t + 1} \quad (6.6.2a)$$





$$(-r_A) = kC_A C_B$$

$$\text{Khi } \frac{C_{B0}}{bC_{A0}} \neq 1$$

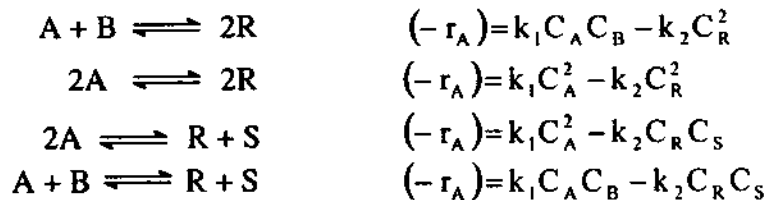
$$t = \frac{1}{kbC_{A0} \left( \frac{C_{B0}}{bC_{A0}} - 1 \right)} \ln \frac{C_{A0} C_B}{C_A C_{B0}} = \ln \frac{\frac{C_{B0}}{bC_{A0}} - X_A}{\frac{C_{B0}}{bC_{A0}} (1 - X_A)}$$

$$\text{Khi } \frac{C_{B0}}{bC_{A0}} = 1$$

$$t = \frac{1}{kC_{B0}} \left( \frac{C_{A0}}{C_A} - 1 \right) = \frac{1}{kC_{B0}} \frac{1 - X_A}{X_A} \quad (6.6.2b)$$

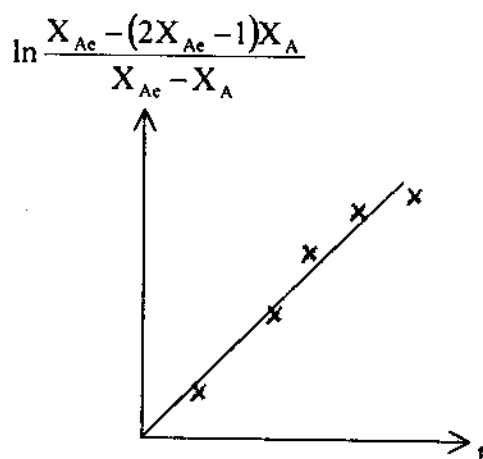
$$\Rightarrow \frac{C_A}{C_{A0}} = \frac{1}{1 + ktC_{B0}}$$

Phản ứng thuận nghịch bậc 2:

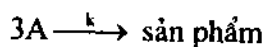


Giả thiết tại thời điểm ban đầu  $C_{A0} = C_{B0}$ ;  $C_{R0} = C_{S0} = 0$

$$t = \frac{1}{2k_1 \left( \frac{1}{X_{Ac}} - 1 \right) C_{A0}} \ln \frac{X_{Ac} - (2X_{Ac} - 1)X_A}{X_{Ac} - X_A} \quad (6.6.2c)$$



- ✓ Phản ứng bậc 3:
- Phản ứng bất thuận nghịch bậc 3:



$$(-r_A) = kC_A^3$$

$$t = \frac{1}{2k} \left( \frac{1}{C_A^2} - \frac{1}{C_{A0}^2} \right) \quad (6.6.3a)$$

$$\Rightarrow \frac{C_A}{C_{A0}} = \frac{1}{\sqrt{2ktC_{A0}^2 + 1}}$$



$$(-r_A) = kC_A^2 C_B$$

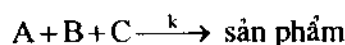
Khi  $C_{A0} \neq C_{B0}$

$$t = \frac{1}{k(C_{B0} - C_{A0})^2} \left[ \frac{(C_{B0} - C_{A0})(C_{A0} - C_A)}{C_{A0}C_A} + \ln \frac{C_{B0}}{C_{A0}C_B} \right] \quad (6.6.3b)$$

Khi  $C_{A0} = C_{B0}$

$$t = \frac{1}{2k} \left( \frac{1}{C_A^2} - \frac{1}{C_{A0}^2} \right) \quad (6.6.3b')$$

$$\Rightarrow \frac{C_A}{C_{A0}} = \frac{1}{\sqrt{2ktC_{A0}^2 + 1}}$$



$$(-r_A) = kC_A C_B C_C$$

Khi  $C_{A0} \neq C_{C0} \neq C_{B0}$

$$t = \frac{1}{k} \left[ \frac{1}{(C_{A0} - C_{B0})(C_{A0} - C_{C0})} \ln \frac{C_{A0}}{C_A} + \frac{1}{(C_{B0} - C_{A0})(C_{B0} - C_{C0})} \ln \frac{C_{B0}}{C_B} \right] \quad (6.6.3c)$$

Khi  $C_{A0} = C_{C0} \neq C_{B0}$

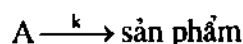
$$t = \frac{1}{k(C_{B0} - C_{A0})^2} \left[ \frac{(2C_{B0} - C_{A0})(C_{A0} - C_A)}{C_{A0}C_A} + \ln \frac{C_{B0}C_A}{C_{A0}C_B} \right] \quad (6.6.3c')$$

Khi  $C_{A0} = C_{B0} = C_{C0}$

$$t = \frac{1}{2k} \left( \frac{1}{C_A^2} - \frac{1}{C_{A0}^2} \right) \quad (6.6.3c'')$$

$$\Rightarrow \frac{C_A}{C_{A0}} = \frac{1}{\sqrt{2ktC_{A0}^2 + 1}}$$

✓ Phản ứng bậc n :



$$(-r_A) = kC_A^n$$

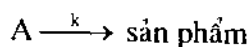
$$t = \frac{1}{(n-1)C_{A0}^{n-1}k} \left( \left( \frac{C_A}{C_{A0}} \right)^{1-n} - 1 \right) \quad (6.6.n)$$

$$\Rightarrow \frac{C_A}{C_{A0}} = \frac{1}{\sqrt[n-1]{(n-1)ktC_{A0}^{n-1} + 1}}$$

Thời gian bán hủy  $t_{1/2}$  được tính:

$$t_{1/2} = \frac{2^{n-1} - 1}{k(n-1)C_{A0}^{n-1}}$$

✓ Các phản ứng bậc thay đổi :

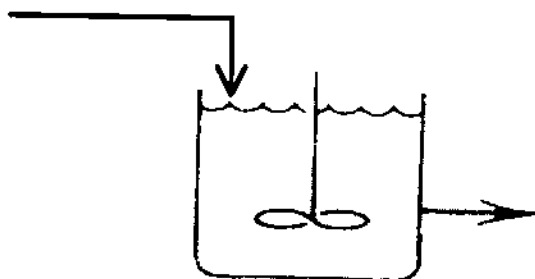


$$(-r_A) = \frac{kC_A}{M + C_A} \quad \begin{cases} \text{Phản ứng bậc 1 tại } C_A \text{ thấp} \\ \text{Phản ứng bậc 0 tại } C_A \text{ cao} \end{cases}$$

$$t = \frac{1}{k} \left( M \ln \frac{C_{A0}}{C_A} + C_{A0} - C_A \right) \quad (6.6.i)$$

$$\frac{C_{A0} - C_A}{\ln \frac{C_{A0}}{C_A}} = -M + k \frac{t}{\ln \frac{C_{A0}}{C_A}}$$

## 6.2. Thiết bị phản ứng khuấy lý tưởng liên tục (Ideal mixed reactor - IMR)



Hình 6.3: Thiết bị phản ứng khuấy lý tưởng liên tục.

Khi tiến hành phản ứng trong thiết bị khuấy lý tưởng liên tục thì các chất tham gia phản ứng được nạp liên tục vào bình phản ứng, được khuấy trộn đều. Như vậy, thành phần của hỗn hợp phản ứng thay đổi theo thời gian nhưng tại bất cứ điểm nào của thiết bị thì thành phần của hỗn hợp phản ứng là như nhau.

Thiết lập cân bằng vật chất:

$$\begin{array}{ccccccc} \text{Lượng chất A} & = & \text{Lượng chất A} & + & \text{Lượng chất A} & + & \text{Lượng chất A} \\ \text{đi vào} & & \text{đi ra} & & \text{đã phản ứng} & & \text{tích lũy} \end{array} \quad (6.7)$$

trong đó:

Lượng chất A đi vào =  $F_{A0} (1 - X_{A0})$ ;

Lượng chất A đi ra =  $F_A \times (1 - X_A)$ ;

Lượng chất A đã phản ứng (số mol/đơn vị thời gian) =  $(-r_A)V$ .

Suy ra:

$$\begin{aligned} F_{A0} (1 - X_{A0}) &= F_{A0} (1 - X_A) + (-r_A)V \\ \Leftrightarrow F_{A0} (X_A - X_{A0}) &= (-r_A)V \\ \Rightarrow \frac{V}{F_{A0}} &= \frac{X_A - X_{A0}}{-r_A} = \frac{\Delta X}{-r_A} \end{aligned}$$

trong đó:  $F_{A0}$  : tốc độ nạp liệu (mol /min);

$V$  : tốc độ dòng (l/min);

$V$  : thể tích thiết bị (l);

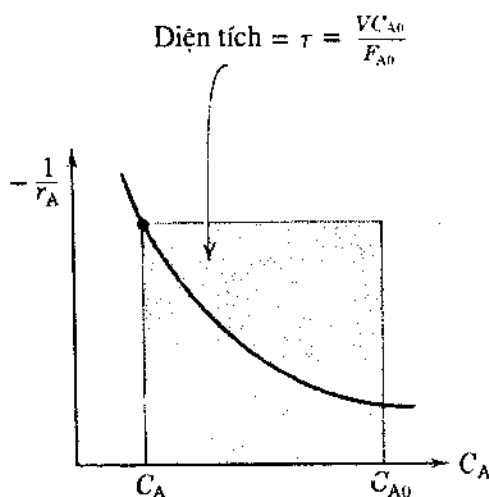
$X$  : độ chuyển hóa .

Vậy: 
$$\tau = \frac{V}{V} = \frac{VC_{A0}}{F_{A0}} = C_{A0} \frac{\Delta X}{-r_A}$$

❖ Trong trường hợp độ chuyển hóa ban đầu = 0 ( $X_{A0} = 0$ ) suy ra:

$$\tau = \frac{V}{V} = \frac{VC_{A0}}{F_{A0}} = C_{A0} \frac{X_A}{-r_A} \quad (6.8)$$

Dạng đồ thị của phương trình (6.8) được biểu diễn qua hình 6.4.

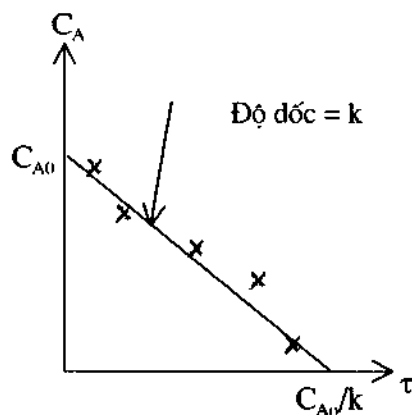


**Hình 6.4:** Đồ thị biểu diễn mối quan hệ giữa nghịch đảo tốc độ phản ứng và nồng độ chất tham gia phản ứng.



- ✓ Phản ứng bậc không:  $A \rightarrow \text{sản phẩm}$ ,  $(-r_A) = k$

$$\tau = \frac{C_{A0} - C_A}{k} \quad (6.8.0)$$

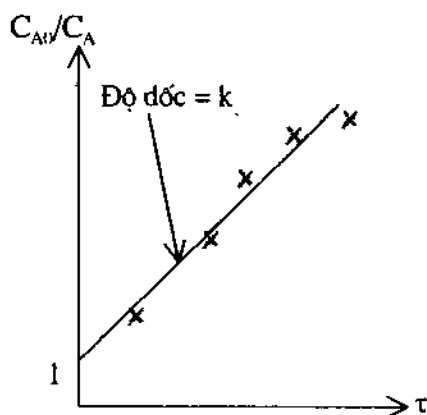


- ✓ Phản ứng bậc 1:

- Phản ứng bất thuận nghịch bậc 1:  $A \rightarrow \text{sản phẩm}$ ,  $(-r_A) = kC_A$

$$\tau = \frac{C_{A0} - C_A}{kC_A} \quad (6.8.1a)$$

$$\Rightarrow \frac{C_A}{C_{A0}} = \frac{1}{1 + k\tau}$$



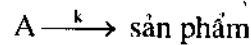
- Phản ứng thuận nghịch bậc 1:  $A \rightleftharpoons R$ ,  $(-r_A) = k_1C_A - k_2C_R$

$$\tau = \frac{1}{k_1} \frac{C_{Re}}{C_{A0} \left( \frac{C_{R0}}{C_{A0}} + r \right)} \frac{C_{A0} - C_A}{C_A - C_{Ac}} \quad (6.8.1b)$$

trong đó  $C_{Ac}$ ,  $C_{Re}$  lần lượt là nồng độ của chất A và R tại trạng thái cân bằng.

✓ Phản ứng bậc 2:

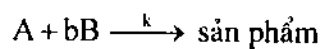
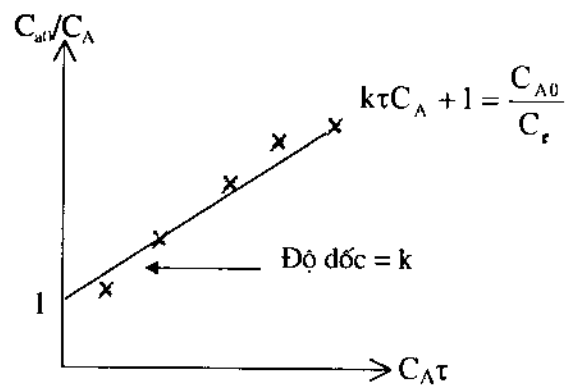
– Phản ứng bất thuận nghịch bậc 2:



$$(-r_A) = kC_A^2$$

$$\tau = \frac{1}{k} \left( \frac{C_{A0} - C_A}{C_A^2} \right) \quad (6.8.2a)$$

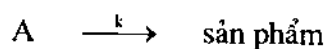
$$C_A = \frac{-1 + \sqrt{1 + k\tau C_{A0}}}{2k\tau}$$



$$(-r_A) = kC_A C_B$$

$$\tau = \frac{C_{A0} - C_A}{kC_A \left( \frac{C_{B0}}{C_{A0}} - b + bC_A \right)} \quad (6.8.2b)$$

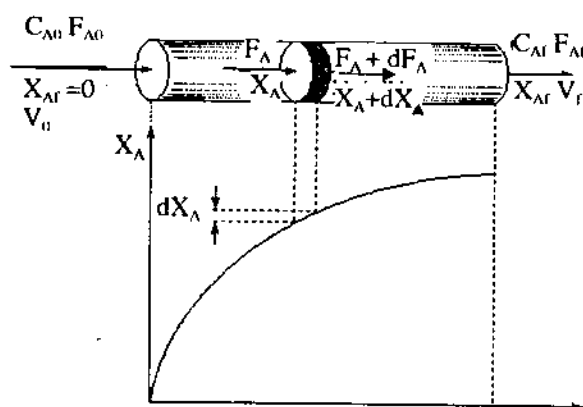
✓ Phản ứng bậc n :



$$(-r_A) = kC_A^n$$

$$\tau = \frac{C_{A0} - C_A}{kC_{A0}^n} \quad (6.8.n)$$

### 6.3. Thiết bị phản ứng ống dòng (Plug flow reactor - PFR)



Hình 6.5: Thiết bị phản ứng ống dòng.

Trong PFR thì thành phần của dòng chảy thay đổi từ vị trí này đến vị trí khác dọc theo dòng chảy. Do đó, cân bằng vật chất cho một cấu tử của phản ứng cần phải được thiết lập cho một vi phân thể tích  $dV$ .

$$\begin{array}{l} \text{Lượng chất A} \\ \text{đi vào} \end{array} = \begin{array}{l} \text{Lượng chất A đi} \\ \text{ra} \end{array} + \begin{array}{l} \text{Lượng chất A} \\ \text{đã phản ứng} \end{array} + \begin{array}{l} \text{Lượng chất A} \\ \text{tích lũy} \end{array} \quad (6.9)$$

Xét trong vi phân thể tích  $dV$ :

- Lượng chất A đi vào =  $F_A$
- Lượng chất A đi ra =  $F_A + dF_A$

$$F_A = (F_A + dF_A) + (-r_A)dV \quad (6.10)$$

– Lượng chất A đã phản ứng  $= (-r_A)dV$

Suy ra:

$$dF_A = d[F_{A0}(1 - X_A)] = -F_{A0} dX_A \quad (6.11)$$

Kết hợp phương trình (6.10) và (6.11) nhận được:

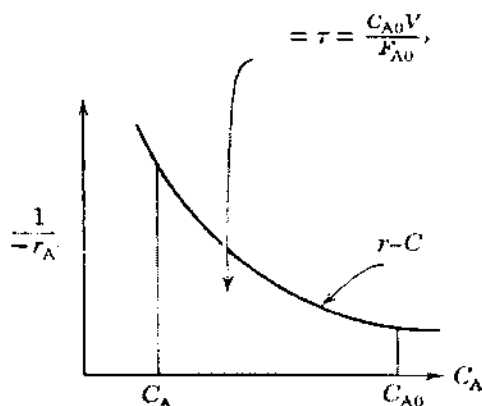
$$F_{A0}dX_A = (-r_A)dV \quad (6.12)$$

Lấy tích phân hai vế của phương trình (6.12) nhận được:

$$\int_0^V \frac{dV}{F_{A0}} = \int_0^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A}$$

$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{V}{\dot{V}C_{A0}} = \int_0^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A} \quad (6.13)$$

$$\tau = \frac{V}{\dot{V}} = C_{A0} \int_0^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A} \quad (6.14)$$



**Hình 6.6:** Đồ thị biểu diễn mối quan hệ giữa nghịch đảo tốc độ phản ứng và nồng độ chất tham gia phản ứng.

Trong trường hợp nguyên liệu đưa vào thiết bị phản ứng có độ chuyển hóa ban đầu  $X_{A0} \neq 0$  thì:

$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{V}{VC_{A0}} = \int_{X_{A0}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A} \quad (6.15)$$

$$\tau = \frac{V}{\dot{V}} = C_{A0} \int_{X_{A0}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A} \quad (6.16)$$

✓ Phản ứng bậc không:  $A \rightarrow$  sản phẩm,  $(-r_A) = k$ ,  $X_{A0} = 0$

$$\tau = \frac{C_{A0}(C_{A0} - C_A)}{k(C_{A0} + C_A)} = X_A \frac{C_{A0}}{k} \quad (6.14.0)$$

✓ Phản ứng bậc 1:

– Phản ứng bất thuận nghịch bậc 1:  $A \rightarrow$  sản phẩm,  $(-r_A) = kC_A$ ,  $X_{A0} = 0$

$$\tau = \frac{1}{k} \ln \frac{1}{1 - X_A} = \ln \frac{C_{A0}}{C_A} \quad (6.14.1a)$$

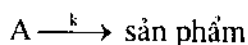
– Phản ứng thuận nghịch bậc 1:  $A \rightleftharpoons R$ ,  $(-r_A) = k_1 C_A - k_2 C_R$

$$\tau = \frac{1}{k_1} \frac{C_{R0} + r \left( 1 - \frac{C_{Ae}}{C_{A0}} \right)}{C_{A0} + r} \ln \frac{C_{A0} - C_{Ae}}{C_A - C_{Ae}} \quad (6.14.1b)$$

$$\tau = \frac{1}{k_1} \frac{C_{R0} + r X_{Ae}}{C_{A0} + r} \ln \frac{X_{Ae}}{X_{Ae} - X_A} \quad (6.14.1c)$$

trong đó :  $C_{Ae}$ ,  $X_{Ae}$  lần lượt là nồng độ và độ chuyển hoá của chất A tại trạng thái cân bằng.

Phản ứng bậc 2:



$$(-r_A) = kC_A^2$$

$$\tau = \frac{1}{kC_{A0}} \left( \frac{C_{A0}}{C_A} - 1 \right) = \frac{1}{kC_{A0}} \frac{X_A}{1 - X_A} \quad (6.14.2)$$

$$\Rightarrow \frac{C_A}{C_{A0}} = \frac{1}{kC_{A0}\tau + 1}$$

## BÀI TẬP CHƯƠNG 6

**Bài 6.1**

Người ta dự định tiến hành một phản ứng  $A \rightarrow R$  trong một thiết bị phản ứng lý tưởng gián đoạn. Tốc độ phản ứng ở các nồng độ tương ứng xác định được như sau:

|                       |     |     |     |     |     |      |      |      |      |       |       |
|-----------------------|-----|-----|-----|-----|-----|------|------|------|------|-------|-------|
| $C_A$ (mol/lit)       | 0,1 | 0,2 | 0,3 | 0,4 | 0,5 | 0,6  | 0,7  | 0,8  | 1,0  | 1,3   | 2,0   |
| $-r_A$ (mol/lit phút) | 0,1 | 0,3 | 0,5 | 0,6 | 0,5 | 0,25 | 0,10 | 0,06 | 0,05 | 0,045 | 0,042 |

Nếu nồng độ của nguyên liệu ban đầu  $C_{A0} = 1,3$  mol/lit thì thời gian lưu của phản ứng sẽ là bao nhiêu nếu nồng độ chất A trong sản phẩm là 0,3 mol/lit.

**Bài 6.2**

Người ta dự định tiến hành một phản ứng  $A \rightarrow R$  trong một thiết bị phản ứng lý tưởng gián đoạn. Tốc độ phản ứng ở các nồng độ tương ứng xác định được như sau:

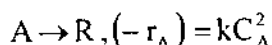
|                       |     |     |     |     |     |      |      |      |      |       |       |
|-----------------------|-----|-----|-----|-----|-----|------|------|------|------|-------|-------|
| $C_A$ (mol/lit)       | 0,1 | 0,2 | 0,3 | 0,4 | 0,5 | 0,6  | 0,7  | 0,8  | 1,0  | 1,3   | 2,0   |
| $-r_A$ (mol/lit phút) | 0,1 | 0,3 | 0,5 | 0,6 | 0,5 | 0,25 | 0,10 | 0,06 | 0,05 | 0,045 | 0,042 |

Nếu nồng độ của nguyên liệu ban đầu  $C_{A0} = 1,2$  mol/lit thì kích thước của phản ứng sẽ là bao nhiêu nếu:

- Độ chuyển hóa của phản ứng là 75% và tốc độ nạp liệu  $F_{A0} = 1000$  molA/giờ.
- Câu (a) với tốc độ nạp liệu tăng gấp đôi.
- Nếu nồng độ chất phản ứng trong nguyên liệu tăng gấp đôi và tốc độ nạp liệu là 1000 molA/giờ và nồng độ chất A ở đầu ra của thiết bị là 0,3 mol/lit thì thể tích của thiết bị phản ứng sẽ là bao nhiêu?

**Bài 6.3**

Một phản ứng đồng thể trong pha lỏng có phương trình phản ứng và phương trình tốc độ như sau:



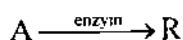
Khi phản ứng tiến hành trong một thiết bị IMR có thể tích V thì độ chuyển hóa của phản ứng là 50%.

- Độ chuyển hóa của phản ứng sẽ là bao nhiêu nếu phản ứng được tiến hành trong một thiết bị phản ứng IMR có thể tích bằng 6 lần thiết bị IMR ban đầu?
- Độ chuyển hóa của phản ứng sẽ là bao nhiêu nếu phản ứng được tiến hành trong một thiết bị phản ứng PFR có thể tích bằng thể tích thiết bị IMR ban đầu?

**Bài 6.4**

Một enzym hoạt động như chất xúc tác trong quá trình lên men chất A.

Hãy tìm thể tích của thiết bị phản ứng PFR này nếu như khi tiến hành phản ứng ở một nồng độ enzym cho trước và với tốc độ nạp liệu là 25 lit/phút thì độ chuyển hóa của phản ứng là 95%.



Biết rằng nồng độ của chất A trong phản ứng đầu  $C_{A0} = 2 \text{ mol/lit}$  và phương trình tốc độ của phản ứng lên men chất A ở nồng độ enzym trên như sau:

$$(-r_A) = \frac{0,1C_A}{1 + 0,5C_A} \frac{\text{mol}}{\text{lit} \times \text{phút}}$$

**Bài 6.5**

Một phản ứng phân hủy chất A trong pha khí  $A \rightarrow R$  có dữ liệu động học như sau:

| $C_A(\text{mol/lit})$       | 1    | 2    | 4    | 6    | 8    | 10   |
|-----------------------------|------|------|------|------|------|------|
| $-r_A(\text{mol/lit giây})$ | 0,01 | 0,02 | 0,04 | 0,09 | 0,16 | 0,25 |



Người ta dự định tiến hành phản ứng này trong một thiết bị phản ứng PFR để đạt được độ chuyển hóa là 80% khi nguyên liệu đầu chứa chất A tinh khiết có nồng độ là 10 mol/lit. Hãy tính thời gian lưu của thiết bị phản ứng này trong trường hợp trên.

### **Bài 6.6**

Phản ứng phân hủy một chất lỏng A được tiến hành trong phòng thí nghiệm bằng một thiết bị IMR. Tại trạng thái dừng xác định được các số liệu động học như sau:

| Nồng độ chất A (mol/lit) |          | Thời gian lưu (s) |
|--------------------------|----------|-------------------|
| Nguyên liệu              | Sản phẩm |                   |
| 2,00                     | 0,65     | 300               |
| 2,00                     | 0,92     | 240               |
| 2,00                     | 1,00     | 250               |
| 1,00                     | 0,56     | 110               |
| 1,00                     | 0,37     | 360               |
| 0,48                     | 0,42     | 24                |
| 0,48                     | 0,28     | 200               |
| 0,48                     | 0,20     | 560               |

Để phản ứng đạt được độ chuyển hóa là 75% khi nồng độ chất A trong nguyên liệu đầu  $C_{A0} = 0,8$  mol/lit thì thời gian lưu cần thiết là bao nhiêu nếu:

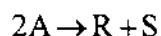
- Phản ứng được tiến hành trong thiết bị PFR;
- Phản ứng được tiến hành trong thiết bị IMR.

### **Bài 6.7**

Phản ứng phân huỷ khí A được thực hiện trong một thiết bị BR có thể tích không đổi ở 100°C thu được số liệu động học như sau:

| t (s) | P <sub>A</sub> (atm) | t (s) | P <sub>A</sub> (atm) |
|-------|----------------------|-------|----------------------|
| 0     | 1,00                 | 140   | 0,25                 |
| 20    | 0,8                  | 200   | 0,14                 |
| 40    | 0,64                 | 260   | 0,08                 |
| 60    | 0, 56                | 330   | 0,04                 |
| 80    | 0,45                 | 420   | 0,02                 |
| 100   | 0,37                 |       |                      |

Phương trình tỉ lượng của phản ứng như sau:



Nếu phản ứng trên được tiến hành ở nhiệt độ 100°C và áp suất 1 atm với tốc độ nạp liệu 100 molA/giờ và trong nguyên liệu chứa 20% khí trơ thì thể tích của thiết bị PFR phải là bao nhiêu để phản ứng đạt được độ chuyển hóa hoá là 95%?

### **Bài 6.8**

Tìm phương trình tốc độ của phản ứng phân hủy chất lỏng A biết rằng khi tiến hành phản ứng phân hủy chất A thì thu được số liệu động học như sau:

| Nồng độ của chất lỏng A trong nguyên liệu đầu | Nồng độ của chất lỏng A trong thiết bị phản ứng | Thời gian lưu của thiết bị phản ứng (s) | Nhiệt độ, °C |
|-----------------------------------------------|-------------------------------------------------|-----------------------------------------|--------------|
| 1,0                                           | 0,4                                             | 220                                     | 44           |
| 1,0                                           | 0,4                                             | 100                                     | 57           |
| 1,0                                           | 0,4                                             | 30                                      | 77           |
| 1,0                                           | 0,1                                             | 400                                     | 52           |
| 1,0                                           | 0,1                                             | 120                                     | 72           |
| 1,0                                           | 0,1                                             | 60                                      | 84           |

## CHƯƠNG 7

### THIẾT BỊ PHẢN ỨNG CÓ THỂ TÍCH THAY ĐỔI

#### 7.1. Thiết bị phản ứng khuấy lý tưởng gián đoạn (Batch reator - BR)

Dạng tổng quát của biểu thức xác định tốc độ phản ứng phụ thuộc vào cấu tử  $i$  trong cả hai trường hợp hệ thống có thể tích không đổi hoặc thay đổi là:

$$r_i = \frac{1}{V} \frac{dN_i}{dt} = \frac{1}{V} \frac{d(C_i V)}{dt} = \frac{1}{V} \frac{V dC_i + C_i dV}{dt}$$

hoặc:

$$r_i = \frac{dC_i}{dt} + \frac{C_i}{V} \frac{dV}{dt} \quad (7.1)$$

Như vậy, để tính  $r_i$  cần xác định cả hai số hạng trên. Thật may mắn là trong trường hợp hệ thống có thể tích không thay đổi thì số hạng thứ hai được loại bỏ, như vậy phương trình trên có thể được đơn giản như sau:

$$r_i = \frac{dC_i}{dt} \quad (7.2)$$

Trong thiết bị phản ứng có thể tích thay đổi có thể tránh dạng phương trình công kênh gồm hai số hạng (7.2) nếu thay vì sử dụng biến số nồng độ ta sử dụng biến số là độ chuyển hóa với điều kiện chấp nhận rằng thể tích của thiết bị phản ứng phụ thuộc tuyến tính vào độ chuyển hóa. Có nghĩa là:

$$V = V_0 (1 + \varepsilon_A X_A) \quad (7.3)$$

trong đó  $\varepsilon_A$  là hệ số thay đổi của thể tích được định nghĩa bằng tỉ số thay đổi thể tích chất phản ứng A được chuyển hóa hoàn toàn và khi chưa được chuyển hóa:

$$\varepsilon_A = \frac{V_{X_A=1} - V_{X_A=0}}{V_{X_A=0}} \quad (7.4)$$

### Ví dụ 7.1

Phản ứng đẳng nhiệt ở pha khí:  $A \rightarrow 4R$

- Khi nguyên liệu là chất A tinh khiết

$$\varepsilon_A = \frac{4-1}{1} = 3$$

- Khi trong nguyên liệu có 50% khí trơ thì khi chuyển hóa hoàn toàn hai phần thể tích nguyên liệu sẽ thành năm phần thể tích sản phẩm:

$$\varepsilon_A = \frac{5-2}{2} = 1,5$$

Chú ý rằng:

$$N_A = N_{A0} (1 - X_A) \quad (7.5)$$

Kết hợp với phương trình (7.3) suy ra:

$$C_A = \frac{N_A}{V} = \frac{N_{A0}(1-X_A)}{V_0(1+\varepsilon_A X_A)} = C_{A0} \frac{1-X_A}{1+\varepsilon_A X_A}$$

$$\Leftrightarrow \frac{C_A}{C_{A0}} = \frac{1-X_A}{1+\varepsilon_A X_A} \quad (7.6)$$

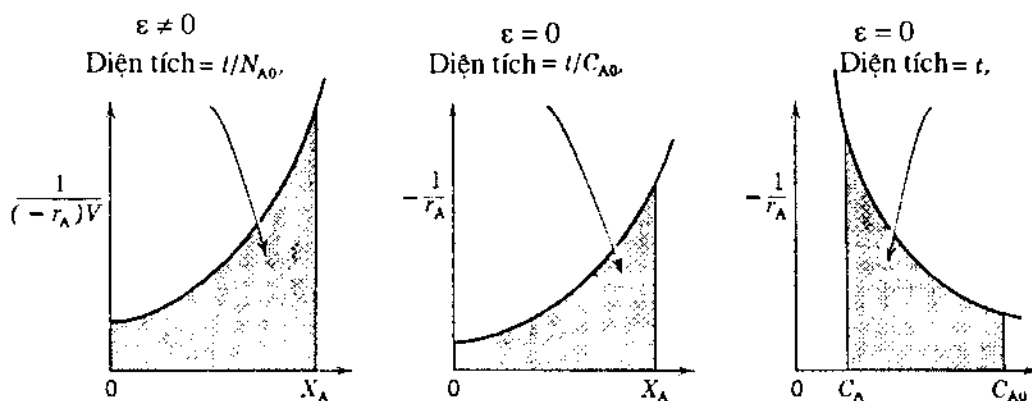
$$X_A = \frac{1 - \frac{C_A}{C_{A0}}}{1 + \varepsilon_A \frac{C_A}{C_{A0}}} \quad (7.7)$$

Từ mối quan hệ giữa độ chuyển hóa và nồng độ đối với các hệ thống có thể tích thay đổi trong phương trình (7.6) và sự phụ thuộc tuyến tính của thể tích vào độ chuyển hóa trong phương trình (7.3) suy ra:

$$\begin{aligned}
 -r_A &= -\frac{1}{V} \frac{dN_A}{dt} = -\frac{1}{V_0(1+\varepsilon_A X_A)} \frac{N_{A0} d(1-X_A)}{dt} \\
 \Leftrightarrow -r_A &= \frac{C_{A0}}{1+\varepsilon_A X_A} \frac{dX_A}{dt}
 \end{aligned} \quad (7.8)$$

Lấy tích phân phương trình (7.8):

$$\begin{aligned}
 (-r_A)dt &= C_{A0} \frac{1}{1+\varepsilon_A X_A} dX_A \\
 \int_0^t dt &= C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)(1+\varepsilon_A X_A)} \\
 t &= C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)(1+\varepsilon_A X_A)}
 \end{aligned} \quad (7.9)$$



**Hình 7.1:** Đồ thị biểu diễn mối quan hệ giữa tốc độ phản ứng và nồng độ chất tham gia phản ứng trong thiết bị khuấy lý tưởng đơn giản.

Phương trình (7.9) là phương trình dùng để tính thời gian lưu trong thiết bị phản ứng gián đoạn BR.

♦ Phản ứng bậc không

Đối với phản ứng đồng thể bậc không, tốc độ phản ứng không phụ thuộc vào nồng độ chất phản ứng, từ phương trình (7.1) và (7.5) ta có:

$$-r_A = -\frac{1}{V} \frac{dN_A}{dt} = \frac{C_{A0}}{1 + \varepsilon_A X_A} \frac{dX_A}{dt} = k \quad (7.10.0a)$$

Kết hợp với các phương trình (7.3) và (7.9) suy ra:

$$C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{1 + \varepsilon_A X_A} = \frac{C_{A0}}{\varepsilon_A} \ln \frac{V}{V_0} = kt \quad (7.10.0b)$$

♦ Các phản ứng bậc 1

Đối với các phản ứng bậc một đơn phân tử vận tốc phản ứng được xác định:

$$-r_A = -\frac{1}{V} \frac{dN_A}{dt} = kC_A \quad (7.10.1a)$$

Kết hợp với phương trình (7.6) suy ra:

$$-r_A = \frac{C_{A0}}{1 + \varepsilon_A X_A} \frac{dX_A}{dt} = \frac{kC_{A0}(1 - X_A)}{1 + \varepsilon_A X_A} \quad (7.10.1b)$$

Kết hợp với phương trình (7.3) và tách các biến số rồi lấy tích phân nhận được:

$$\int_0^{X_A} \frac{dX_A}{1 - X_A} = -\ln(1 - X_A) = -\ln\left(1 - \frac{\Delta V}{\varepsilon_A V_0}\right) = kt \quad (7.10.1c)$$

♦ Các phản ứng bậc 2

Đối với các phản ứng lưỡng phân tử bậc hai:  $2A \rightarrow \text{Sản phẩm}$ ,  $-r_A = kC_A^2$

hoặc  $A + B \rightarrow \text{Sản phẩm}$ ,  $C_{A0} = C_{B0}$

Kết hợp với các phương trình (7.7), (7.8) suy ra:

$$-r_A = \frac{C_{A0}}{1 + \varepsilon_A X_A} \frac{dX_A}{dt} = kC_{A0}^2 \left( \frac{1 - X_A}{1 + \varepsilon_A X_A} \right)^2 \quad (7.10.2a)$$

Tách các biến số và lấy tích phân nhận được:

$$\int_0^{X_A} \frac{1+\varepsilon_A X_A}{(1-X_A)^2} dX_A = \frac{(1+\varepsilon_A)X_A}{1-X_A} + \varepsilon_A \ln(1-X_A) = kC_{A0}t \quad (7.10.2b)$$

◆ Phản ứng bậc n

Đối với phản ứng bậc n, phương trình tốc độ phản ứng có dạng:

$$-r_A = kC_A^n = kC_{A0}^n \left( \frac{1-X_A}{1+\varepsilon_A X_A} \right)^n \quad (7.10.na)$$

Kết hợp với phương trình (7.9) nhận được:

$$C_{A0}^{n-1} kt = \int_0^{X_A} \frac{(1+\varepsilon_A X_A)^{n-1}}{(1-X_A)^n} dX_A \quad (7.10.nb)$$

## 7.2. Thiết bị phản ứng khuấy lý tưởng liên tục (Ideal mixed reactor - IMR)

$$\begin{array}{ccccccc} \text{Lượng chất} & = & \text{Lượng chất} & + & \text{Lượng chất A} & + & \text{Lượng chất A} \\ \text{A đi vào} & & \text{A đi ra} & & \text{đã phản ứng} & & \text{tích lũy} \end{array}$$

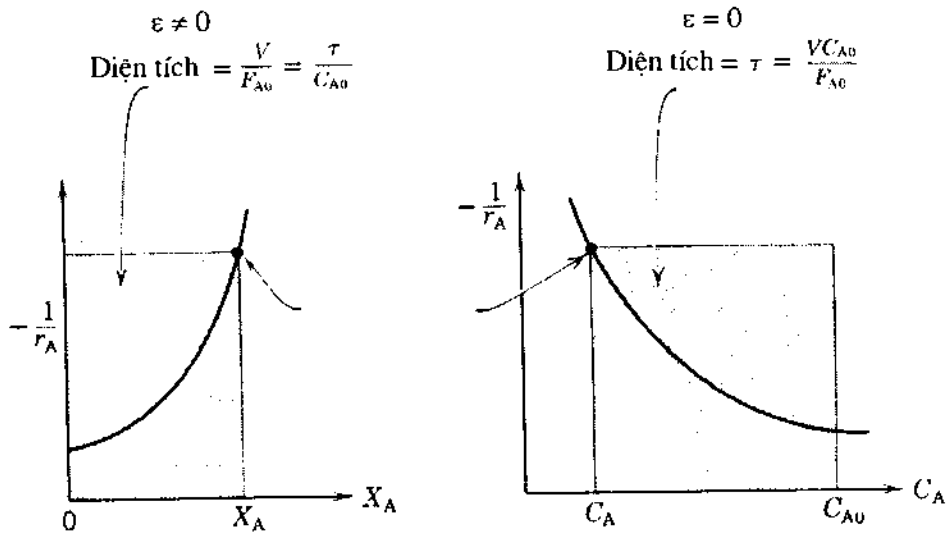
trong đó:

- Lượng chất A đi vào =  $F_{A0}(1 - X_{A0})$ ;
- Lượng chất A đi ra =  $F_A(1 - X_A)$ ;
- Lượng chất A đã phản ứng (số mol/đơn vị thời gian) =  $(-r_A)V$ .

Suy ra:

$$\begin{aligned} F_{A0}(1 - X_{A0}) &= F_A(1 - X_A) + (-r_A)V \\ \Leftrightarrow F_{A0}(X_A - X_{A0}) &= (-r_A)V \\ \Rightarrow \frac{V}{F_{A0}} &= \frac{X_A - X_{A0}}{-r_A} = \frac{\Delta X}{-r_A} \end{aligned} \quad (7.11)$$

Suy ra: 
$$\tau = \frac{V}{\dot{V}} = \frac{VC_{A0}}{F_{A0}} = C_{A0} \cdot \frac{\Delta X}{-r_A} \quad (7.12)$$



**Hình 7.2:** Đồ thị biểu diễn mối quan hệ giữa nồng độ chất tham gia phản ứng và tốc độ phản ứng trong thiết bị phản ứng khuấy lý tưởng liên tục.

- ❖ Trong trường hợp độ chuyển hóa ban đầu  $= 0$  ( $X_{A0} = 0$ ), từ phương trình (7.11) và (7.12) suy ra:

$$\tau = \frac{V}{\dot{V}} = \frac{VC_{A0}}{F_{A0}} = C_{A0} \frac{X_A}{-r_A} \quad (7.13)$$

Mặt khác, theo phương trình (7.3) và (7.6):

$$V = V_0 (1 + \varepsilon_A X_A)$$

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = \frac{1 - X_A}{1 + \varepsilon_A X_A}$$

Đối với phản ứng bậc 1 suy ra:

$$k\tau = \frac{X_A (1 + \varepsilon_A X_A)}{1 - X_A} \quad (7.14)$$

### Ví dụ 7.2

Phản ứng dime hóa một chất khí A tinh khiết ( $2A \rightarrow R$ ) có nồng độ ban đầu  $C_{A0} = 100$  milimol/lit được nạp vào thiết bị IMR có thể tích  $V = 0,1$  lit. Ở các



lần chạy có tốc độ nạp liệu khác nhau nhận được các giá trị nồng độ chất A ở đầu ra tương ứng như sau:

| Số lần chạy         | 1    | 2    | 3   | 4    |
|---------------------|------|------|-----|------|
| Tốc độ nạp liệu     | 30,0 | 9,0  | 3,6 | 1,5  |
| $C_A$ (milimol/lit) | 85,7 | 66,7 | 50  | 33,3 |

Tìm phương trình tốc độ của phản ứng.

Lời giải

Đối với phương trình tỉ lượng đã cho thì hệ số thay đổi thể tích  $\epsilon_A$  là:

$$\epsilon_A = \frac{1-2}{2} = -\frac{1}{2}$$

Mối quan hệ giữa nồng độ và độ chuyển hóa như sau:

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = \frac{1-X_A}{1+\epsilon_A X_A} = \frac{1-X_A}{1-\frac{1}{2}X_A}$$

hay:

$$X_A = \frac{1 - \frac{C_A}{C_{A0}}}{1 + \epsilon_A \frac{C_A}{C_{A0}}} = \frac{1 - \frac{C_A}{C_{A0}}}{1 - \frac{C_A}{2C_{A0}}}$$

Từ đó tính được độ chuyển hóa và tốc độ phản ứng khi đi ra khỏi thiết bị như sau:

| Lần chạy | Nhận được |            | Tính được |                                            |
|----------|-----------|------------|-----------|--------------------------------------------|
|          | $\dot{V}$ | $C_{A,ra}$ | $X_A$     | $(-r_A)_{ra} = \frac{\dot{V}C_{A0}X_A}{V}$ |
| 1        | 30,0      | 85,7       | 0,25      | $\frac{(30)(100)(0,25)}{0,1} = 7500$       |

|   |     |      |       |      |
|---|-----|------|-------|------|
| 2 | 9,0 | 66,7 | 0,50  | 4500 |
| 3 | 3,6 | 50   | 0,667 | 2400 |
| 4 | 1,5 | 33,3 | 0,80  | 1200 |

So sánh các giá trị  $(-r_A)$  và  $C_A$  trong bảng trên với biểu thức động học của phản ứng:

$$-r = kC_A^n$$

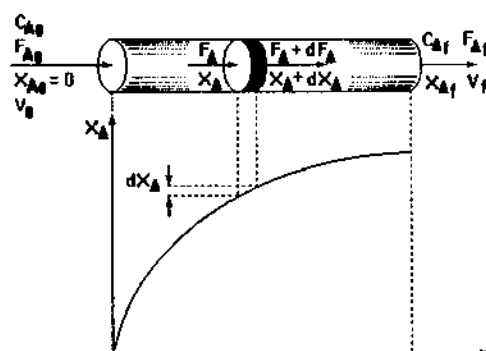
Lấy logarit hai vế:

$$\lg(-r_A) = \lg k + n \lg C_A$$

Đồ thị của phương trình trên có dạng đường thẳng  $y = ax + b$ . Thiết lập đồ thị từ các giá trị đã biết:

$$-r_A = \left( 1,0 \frac{\text{lit}}{\text{giờ} \times \text{mmol}} \right) C_A^2, \left[ \frac{\text{mmol}}{\text{lit} \times \text{giờ}} \right]$$

### 7.3. Thiết bị phản ứng ống dòng (Plug flow reactor - PFR)



Hình 7.3: Thiết bị phản ứng ống dòng.

Trong PFR thì thành phần của dòng chảy thay đổi từ vị trí này đến vị trí khác dọc theo dòng chảy. Do đó, cân bằng vật chất cho một cấu tử của phản ứng cần phải được thiết lập cho một vi phân thể tích  $dV$ .

Đối với một cấu tử A:

$$\text{Lượng chất A đi vào} = \text{Lượng chất A đi ra} + \text{Lượng chất A đã phản ứng} + \text{Lượng chất A tích lũy}$$

Xét trong vi phân thể tích  $dV$ :

– Lượng chất A đi vào =  $F_A$

Lượng chất A đi ra =  $F_A + dF_A$

$$F_A = (F_A + dF_A) + (-r_A)dV \quad (7.15)$$

– Lượng chất A đã phản ứng =  $(-r_A)dV$

Suy ra:

$$dF_A = d[F_{A0}(1 - X_A)] = -F_{A0} dX_A \quad (7.16)$$

Kết hợp phương trình (7.15) và (7.16) nhận được:

$$F_{A0} dX_A = (-r_A) dV \quad (7.17)$$

Lấy tích phân hai vế của phương trình (7.17) nhận được:

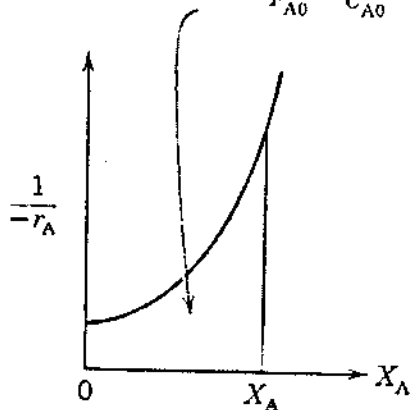
$$\int_0^V \frac{dV}{F_{A0}} = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A}$$

$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{V}{V C_{A0}} = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A} \quad (7.18)$$

$$\tau = \frac{V}{\dot{V}} = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A} \quad (7.19)$$

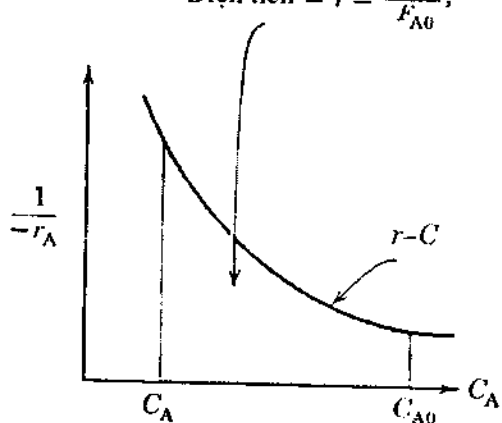
$\varepsilon \neq 0$

Diện tích =  $\frac{V}{F_{A0}} = \frac{\tau}{C_{A0}}$



$\varepsilon \neq 0$

Diện tích =  $\tau = \frac{C_{A0} V}{F_{A0}}$



**Hình 7.4:** Đồ thị biểu diễn mối quan hệ giữa tốc độ phản ứng và nồng độ chất tham gia phản ứng.

Trong trường hợp nguyên liệu đưa vào thiết bị phản ứng có độ chuyển hóa ban đầu  $X_{A0} \neq 0$  thì:

$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{V}{\dot{V}C_{A0}} = \int_{X_{A0}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A} \quad (7.20)$$

$$\tau = \frac{V}{\dot{V}} = C_{A0} \int_{X_{A0}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A} \quad (7.21)$$

trong đó:

$$X_A = \frac{1 - \frac{C_A}{C_{A0}}}{1 + \varepsilon_A \frac{C_A}{C_{A0}}}$$

- Phản ứng đồng thể bậc không:

Lấy tích phân phương trình (7.21) với  $X_{A0} = 0$ ,  $(-r_A) = k$  ta có:

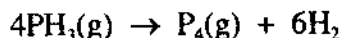
$$k\tau = \frac{kC_{A0}V}{F_{A0}} = C_{A0}X_A \quad (7.22.0)$$

- Phản ứng bất thuận nghịch bậc 1:  $A \rightarrow$  Sản phẩm, tương tự ta có:

$$k\tau = -(1 + \varepsilon_A) \ln(1 - X_A) - \varepsilon_A X_A \quad (7.22.1a)$$

### Ví dụ 7.3

Phản ứng phân hủy photphin:



xảy ra ở 1200°F và 4,6 atm trong thiết bị ống dòng và có phương trình tốc độ như sau:

$$-r_{\text{PH}_3} = (10 / \text{giờ}) C_{\text{PH}_3}$$

Tính thể tích của thiết bị phản ứng nếu phản ứng đạt độ chuyển hóa là 80% và tốc độ nạp liệu là  $F_{A0} = 4$  lb-mol photphin tinh khiết/giờ

Biết rằng khoảng nhiệt độ giữa nhiệt độ đóng băng của nước theo độ C, F, R trong bảng sau:

| Các thang nhiệt độ              | Nhiệt độ đóng băng của nước (P = atm) | Nhiệt độ sôi của nước (P = atm) |
|---------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------|
| $^{\circ}\text{C}$ (Celsius)    | 0                                     | 100                             |
| $^{\circ}\text{F}$ (Fahrenheit) | 32                                    | 212                             |
| $^{\circ}\text{R}$ (Rankin)     | 491,69                                |                                 |

Tại nhiệt độ tuyệt đối:  $-273,16^{\circ}\text{C} = 0^{\circ}\text{R} = -459,69^{\circ}\text{F}$

$1 \text{ ft}^3 = 0,0283 \text{ m}^3$  và  $1 \text{ lb-mol} = 0,454 \text{ mol}$

### Lời giải

Từ phương trình (7.18) suy ra:

$$V = F_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A}$$

Ở áp suất không đổi:

$$C_A = C_{A0} \left( \frac{1 - X_A}{1 + \varepsilon_A X_A} \right)$$

Vì vậy:

$$V = \frac{F_{A0}}{kC_{A0}} \int_0^{X_A} \frac{1 + \varepsilon_A X_A}{1 - X_A} dX_A$$

Lấy tích phân phương trình trên nhận được:

$$V = \frac{F_{A0}}{kC_{A0}} \left[ (1 + \varepsilon_A) \ln \frac{1}{1 - X_A} - \varepsilon_A X_A \right]$$

Mặt khác:

Theo phương trình Clapeyron-Mendeleev:  $PV = nRT$

Suy ra:

$$P = \frac{n}{V} RT = CRT$$

$$\Rightarrow C_{A0} = \frac{P_{A0}}{RT} = \frac{4 \text{ lb-mol/giờ}}{(0,729 \text{ ft}^3 \times \text{atm/lb-mol} \times ^{\circ}\text{R})(1660^{\circ}\text{R})} = 0,0038 \text{ lb-mol/ft}^3$$

$$\text{và } \varepsilon_A = \frac{7-4}{4} = 0,75$$

Thay các giá trị đã biết vào phương trình trên nhận được:

$$V = \frac{4 \text{ lb-mol/giờ}}{(10/\text{giờ})(0,0038 \text{ lb-mol/ft}^3)} \left[ (1+0,75) \ln \frac{1}{0,2} - 0,75 \times 0,8 \right] = 234 \text{ ft}^3$$

$$= 234 \times 0,0283 = 6,6222 \text{ m}^3$$

Hoặc ta có thể đổi các đơn vị ra hệ thống đơn vị SI ngay từ đầu:

$$1 \text{ lb-mol} = 0,454 \text{ mol}$$

$$1 \text{ atm} = 101,3 \text{ N/m}^2$$

$$1^\circ \text{C} = 1,8^\circ \text{F}$$

Suy ra:

$$P = \frac{n}{V} RT = CRT$$

$$\Rightarrow C_{A0} = \frac{P_{A0}}{RT} = \frac{4,6 \times 101,3 \left( \frac{\text{N}}{\text{m}^2} \right)}{8,314 \left( \frac{\text{J}}{\text{mol} \times \text{K}} \right) \times \left( \frac{1200}{1,8} + 273,16 \right) (\text{K})} = 0,06 \text{ mol/m}^3$$

$$\text{và } \varepsilon_A = \frac{7-4}{4} = 0,75$$

Thay các giá trị đã biết vào phương trình trên nhận được:

$$V = \frac{4 \times 0,454 \text{ mol/giờ}}{(10/\text{giờ})(0,06 \text{ mol/m}^3)} \left[ (1+0,75) \ln \frac{1}{0,2} - 0,75 \times 0,8 \right] = 6,708 \text{ m}^3$$

- ❖ Tuy nhiên, đối với các phản ứng có hệ số thay đổi thể tích  $\varepsilon \neq 0$  trong thiết bị phản ứng lý tưởng liên tục thời gian lưu thực của thiết bị thay đổi.
- ◆ Đối với thiết bị IMR thời gian lưu thực được định nghĩa:

$$t_{\text{thực}} = \frac{V}{\dot{V}_r} = \frac{V}{\dot{V}_0 (1 + \varepsilon_A X_A)} \quad (7.23)$$

Thay cho định nghĩa về thời gian lưu biểu kiến:

$$\tau = \frac{V}{V_0}$$

- ♦ Đối với thiết bị phản ứng ống dòng PFR thời gian lưu thực  $t_{thực}$  được xác định bằng cách:

Theo phương trình (7.17):

$$F_{A0} dX_A = (-r_A) dV$$

$$\Rightarrow dV = F_{A0} \frac{dX_A}{(-r_A)}$$

Trong một vi phân thời gian lưu sẽ có một sự thay đổi một vi phân thể tích tương ứng:

$$dt = \frac{dV}{\dot{V}}$$

Kết hợp hai phương trình trên suy ra biểu thức tính thời gian lưu thực đối với thiết bị PFR:

$$dt = F_{A0} \frac{dX_A}{\dot{V}(-r_A)}$$

$$\Rightarrow \int_0^1 dt = F_{A0} \int_0^{X_{Af}} \frac{dX_A}{\dot{V}(-r_A)}$$

Lưu ý rằng:

$$F_{A0} = C_{A0} \dot{V}_0$$

(Đối với các phản ứng có hệ số thay đổi  $\varepsilon = 0$  thì:

$$F_{A0} = C_{A0} \dot{V} \quad \text{do} \quad \dot{V} = (1 + \varepsilon_A X_A) \dot{V}_0 = \dot{V}_0$$

Suy ra:

$$\int_0^1 dt = C_{A0} \int_0^{X_{Af}} \frac{\dot{V}_0 dX_A}{\dot{V}_0 (1 + \varepsilon_A X_A) (-r_A)}$$

$$t_{thực} = C_{A0} \int_0^{X_{Af}} \frac{dX_A}{(1 + \varepsilon_A X_A) (-r_A)} \quad (7.24)$$

(Chú ý: ta cần chứng minh biểu thức:

$$\frac{\dot{V}}{\dot{V}_0} = (1 + \varepsilon_A X_A)$$

Từ biểu thức (7.6):

$$\frac{C_{A0}}{C_A} = \frac{1 + \varepsilon_A X_A}{1 - X_A}$$

$$\Rightarrow C_A = \frac{C_{A0}}{\frac{1 + \varepsilon_A X_A}{1 - X_A}}$$

Mặt khác:

$$F_A = F_{A0} (1 - X_A)$$

Suy ra:

$$C_A \dot{V} = C_{A0} \dot{V}_0 (1 - X_A)$$

Kết hợp các phương trình trên suy ra:

$$\frac{C_{A0}}{\frac{1 + \varepsilon_A X_A}{1 - X_A}} \dot{V} = C_{A0} \dot{V}_0 (1 - X_A)$$

Giản ước hai vế của phương trình suy ra biểu thức cần chứng minh).

#### Ví dụ 7.4

Xét phản ứng có phương trình tỉ lượng:  $A \rightarrow 3R$ , có tốc độ nạp liệu là 1 lit khí A/s và có độ chuyển hóa của phản ứng là 50% được tiến hành trong thiết bị có thể tích 1 lit.

a) Đối với thiết bị IMR:

Như vậy, trong phản ứng này thì thời gian lưu biểu kiến được tính:

$$\tau = \frac{V}{\dot{V}_0} = \frac{1 \text{ lit}}{1 \text{ lit/s}} = 1 \text{ s}$$

Trong khi đó thời gian lưu thực được xác định:

$$t_{\text{thực}} = \frac{V}{\dot{V}_r} = \frac{V}{\dot{V}_0 (1 + \varepsilon_A X_A)} = \frac{1 \text{ lit}}{2 \text{ lit/s}} = \frac{1}{2} \text{ s}$$



Trong đó:

- Hệ số thay đổi thể tích được tính từ phương trình tỉ lượng của phản ứng:

$$\varepsilon = \frac{3-1}{1} = 2$$

- Vận tốc dòng khí đi ra khỏi thiết bị:

$$\dot{V}_r = \dot{V}_0 (1 + \varepsilon_A X_A) = \dot{V}_0 \left(1 + 2 \times \frac{1}{2}\right) = 2\dot{V}_0$$

- b) Đối với thiết bị PFR thì khi không biết phương trình tốc độ của phản ứng ta không thể xác định được thời gian lưu thực của thiết bị. Tuy nhiên, người ta tính được rằng thời gian lưu này xấp xỉ bằng 1.

Thời gian lưu biểu kiến của thiết bị được tính theo phương trình (7.21):

$$\tau = \frac{V}{\dot{V}_0} = C_{A0} \int_{X_{A0}}^{X_{Ar}} \frac{dX_A}{-r_A}$$

Thời gian lưu thực của thiết bị được tính theo phương trình (7.24):

$$t_{\text{thực}} = C_{A0} \int_0^{X_{Ar}} \frac{dX_A}{(1 + \varepsilon_A X_A)(-r_A)}$$

- Xét cho phản ứng bậc 1:  $(-r_A) = kC_A$

$$\tau = \frac{V}{\dot{V}_0} = \frac{1(\text{lit})}{1(\text{lit/s})} = 1 \text{ s}$$

Suy ra:

$$\begin{aligned} C_{A0} \int_0^{0.5} \frac{dX_A}{kC_A} &= 1 \\ \Leftrightarrow C_{A0} \int_0^{0.5} \frac{dX_A}{kC_{A0}(1 + \varepsilon_A X_A)} &= \int_0^{0.5} \frac{dX_A}{k(1 + \varepsilon_A X_A)} = 1 \\ k\tau &= -(1 + \varepsilon_A) \ln(1 - X_A) - \varepsilon_A X_A \\ k \times 1 &= 3 \ln 2 - 1 \end{aligned}$$

Thay vào phương trình tính thời gian lưu thực khi phản ứng là bậc 1 suy ra:

$$t_{\text{thực}} = C_{A0} \int_0^{X_{Ar}} \frac{dX_A}{(1 + \varepsilon_A X_A) k C_A}$$

$$kt_{\text{thực}} = \ln \frac{1}{1 - X_A} = \ln 2 = (3 \ln 2 - 1) t_{\text{thực}}$$

$$\Rightarrow t_{\text{thực}} = \frac{\ln 2}{3 \ln 2 - 1} \approx 0,642s$$

## BÀI TẬP CHƯƠNG 7

**Bài 7.1**

Sự phân hủy khí A xảy ra theo phản ứng:  $2A \rightarrow 3R + S$  được tiến hành trong một thiết bị ống dòng có thể tích  $V = 10 \text{ cm}^3$ . Nồng độ ban đầu của khí A là  $C_{A0} = 1000 \text{ mmol/lit}$ .

Ứng với mỗi tốc độ nạp liệu khác nhau, người ta tiến hành xác định nồng độ của chất A ở lối ra của thiết bị phản ứng và thu được bảng dữ liệu sau:

|                                    |     |    |     |     |
|------------------------------------|-----|----|-----|-----|
| $\dot{V} (\text{cm}^3 / \text{s})$ | 0,5 | 3  | 16  | 60  |
| $C_A, \text{ mmol/lit}$            | 10  | 50 | 200 | 500 |

Hãy xác định tốc độ của phản ứng tại thời điểm  $C_A = 250 \text{ mmol/lit}$ .

**Bài 7.2**

Một phản ứng trong pha khí  $A \rightarrow 3R$  được thực hiện trong thiết bị IMR có thể tích  $V = 1 \text{ lit}$ . Nồng độ ban đầu của khí A là  $C_{A0} = 120 \text{ mmol/lit}$ .

Người ta đưa khí này vào thiết bị phản ứng ở áp suất 30 atm và nhiệt độ  $30^\circ\text{C}$  với các tốc độ nạp liệu khác nhau, sau đó tiến hành xác định nồng độ của khí ở lối ra thu được bảng dữ liệu sau:

|                                      |      |      |     |     |
|--------------------------------------|------|------|-----|-----|
| $\dot{V} (\text{lit} / \text{phút})$ | 0,06 | 0,48 | 1,5 | 8,1 |
| $C_A, \text{ mmol/lit}$              | 30   | 60   | 80  | 105 |

Tìm phương trình động học của phản ứng phân huỷ chất A.

**Bài 7.3**

Phản ứng khí đồng thể  $A \rightarrow 3R$  được tiến hành trong thiết bị ống dòng ở  $215^\circ\text{C}$  và 5 atm với  $C_{A0} = 0,0625 \text{ mol/l}$ . Hãy xác định thời gian cần thiết để độ chuyển hoá dòng nguyên liệu gồm 50% A và 50% tạp chất đạt được 80%.

Cho biết phương trình tốc độ của phản ứng như sau:

$$-r_A = 10^{-2} C_A^{1/2} \quad (\text{mol/lit}\times\text{s})$$

**Bài 7.4**

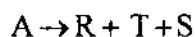
Phản ứng dime hoá chất khí A tinh khiết thành sản phẩm R ( $2A \rightarrow R$ ) được tiến hành trong thiết bị IMR có thể tích bằng 0,1 lit, nồng độ ban đầu của chất A là  $C_{A0} = 100 \text{ mmol/lit}$ . Bằng cách thay đổi thể tích nạp liệu, người ta thu được các giá trị  $C_A$  như sau:

|                          |      |      |     |      |
|--------------------------|------|------|-----|------|
| Tốc độ nạp liệu          | 30,0 | 9,0  | 3,6 | 1,5  |
| $C_A \text{ (mmol/lit)}$ | 85,7 | 66,7 | 50  | 33,3 |

Hãy tìm phương trình tốc độ của phản ứng trên.

**Bài 7.5**

Phản ứng phân hủy chất A:



xảy ra ở điều kiện đồng thể, pha khí trong một thiết bị ống dòng tại áp suất và nhiệt độ không đổi. Người ta xác định được rằng để đạt được độ chuyển hóa 95% cần thời gian lưu biểu kiến  $\tau = 2,7$  phút.

Hãy xác định thời gian lưu thực đối với thiết bị trên, biết rằng phản ứng có bậc 2.

$$-r_A = kC_A^2$$

**Bài 7.6**

Phản ứng  $A \rightarrow 2R + S$  xảy ra ở điều kiện đồng thể pha khí trong thiết bị khuấy lý tưởng gián đoạn BR ở áp suất không đổi. Hỗn hợp các hợp chất ban đầu 75%A, 25% chất trơ. Thể tích khối hỗn hợp phản ứng tăng gấp đôi sau 8 phút.

Hãy xác định:

- Độ chuyển hóa đạt được khi đó.
- Trong trường hợp tiến hành phản ứng trong thiết bị ống dòng với tốc độ nạp liệu 500 ml/giờ thì thể tích của thiết bị phản ứng phải bằng bao nhiêu để đạt được độ chuyển hóa nói trên.

Cho biết phản ứng này là phản ứng bậc 1.

**Bài 7.7**

Xét phản ứng pha khí:  $2A \rightarrow R + 2S$  được thực hiện trong thiết bị PFR. Để đạt độ chuyển hóa là 90% thì thời gian lưu cần thiết là 1 s. Hãy xác định thời gian lưu thực của thiết bị phản ứng này. Biết rằng phương trình tốc độ của phản ứng như sau:

$$-r_A = k C_A^2$$

**Bài 7.8**

Quá trình phân hủy nhiệt hidrocarbon có khối lượng phân tử lớn A thành các phân tử có khối lượng nhỏ hơn gọi chung là R được tiến hành trong thiết bị IMR. Phương trình tỉ lệ của phản ứng nhiệt phân được viết:  $A \rightarrow 5R$ . Bằng cách thay đổi tốc độ nạp liệu thì nồng độ chất A ở đầu ra của thiết bị được xác định như sau:

|                           |     |      |      |      |
|---------------------------|-----|------|------|------|
| $F_{A0}$ (mmol/giờ)       | 300 | 1000 | 3000 | 5000 |
| $C_{A^*}$ cuối (mmol/lit) | 16  | 30   | 50   | 60   |

Thể tích của thiết bị phản ứng là 0,1 lit và nguyên liệu được nạp vào ở nồng độ đầu  $C_{A0} = 100$  mmol/lit.

Hãy xác định phương trình tốc độ của phản ứng.

### **Bài 7.9**

Một hỗn hợp gồm khí A và khí trơ (trong đó 1/3 là khí A có nồng độ  $C_{A0} = 1000$  mmol/lit và còn lại là khí trơ) được dẫn vào thiết bị PFR (có thể tích 100  $\text{cm}^3$ ) và xảy ra quá trình nhiệt phân ( $A \rightarrow 4R$ ). Đối với các tốc độ nạp liệu khác nhau thì nồng độ chất A khi đi ra khỏi thiết bị khác nhau tương ứng trong bảng sau:

|                                  |     |     |     |     |     |
|----------------------------------|-----|-----|-----|-----|-----|
| $\dot{V} (\text{cm}^3/\text{s})$ | 1,5 | 2,5 | 4   | 6,5 | 20  |
| $C_A$ (mmol/lit)                 | 10  | 50  | 100 | 200 | 500 |

Hãy tìm thể tích  $V'$  của thiết bị phản ứng nếu như nguyên liệu chỉ chứa chất A tinh khiết được nạp vào thiết bị với tốc độ 100  $\text{cm}^3/\text{s}$  thì độ chuyển hoá đạt 66,7%.

### **Bài 7.10**

Một dòng khí A được nạp vào thiết bị PFR có thể tích 100  $\text{cm}^3$  với nồng độ ban đầu  $C_{A0} = 1000$  mmol/lit và phân hủy nhiệt theo phương trình tỉ lệ lượng  $A \rightarrow 4R$ . Các nồng độ tương ứng của chất A ở đầu ra của thiết bị theo các tốc độ nạp liệu khác nhau được cho trong bảng sau:

|                            |     |    |     |     |     |
|----------------------------|-----|----|-----|-----|-----|
| $\tau = \frac{V}{\dot{V}}$ | 100 | 48 | 25  | 12  | 3   |
| $C_A$ (mmol/lit)           | 10  | 50 | 100 | 200 | 500 |

Tìm phương trình vận tốc phản ứng.

### **Bài 7.11**

Một hỗn hợp khí gồm 20% khí ozon và 80% không khí ở áp suất 1,5 atm và nhiệt độ 93  $^{\circ}\text{C}$  được nạp vào thiết bị PFR với tốc độ 1lit/s. Dưới những điều kiện này  $\text{O}_3$  bị phân hủy theo phản ứng khí đồng thể:  $2\text{O}_3 \rightarrow 3\text{O}_2$

Biết phương trình tốc độ của phản ứng như sau:

$$(-r_{O_3}) = kC_{O_3}^2 \quad \text{với} \quad k = 0,05 \frac{\text{lit}}{\text{mol} \times \text{s}}$$

Hãy tìm kích thước của thiết bị để 50%  $O_3$  bị phân hủy.

### **Bài 7.12**

Sau khi oxi hóa amoniac người ta thu được một hỗn hợp khí gồm:

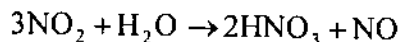
10% khí nitơ oxit (A)

1% khí nitơdioxit (R)

8% khí oxy (B)

81% là các khí khác (I)

Tiếp tục tiến hành oxi hóa khí NO thành  $NO_2$  cho tới khi đạt được tỉ lệ NO:  $NO_2 = 8:1$ . Khí  $NO_2$  được hấp thụ trong nước tạo thành axit nitric theo phương trình phản ứng:



Hãy tính kích thước của thiết bị phản ứng ống dòng cần thiết để đáp ứng nhiệm vụ đặt ra.

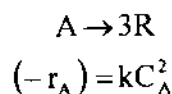
Biết rằng phản ứng được tiến hành ở nhiệt độ  $20^\circ\text{C}$  và áp suất 1 atm với tốc độ nạp liệu là  $10000 \text{ m}^3/\text{giờ}$  (ở nhiệt độ  $0^\circ\text{C}$  và áp suất 1 atm) và tại  $20^\circ\text{C}$  phản ứng oxi hoá khí nitơ oxit thành khí nitơ đioxit ( $2NO + O_2 \rightarrow 2NO_2$ ) có phương trình tốc độ như sau:

$$r_{NO_2} = 14000 C_{NO}^2 C_{O_2} \left( \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 \times \text{s}} \right)$$

### **Bài 7.13**

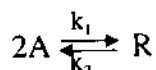
Để tăng độ chuyển hóa của một phản ứng tiến hành ở cùng một tốc độ nạp liệu trong thiết bị PFR từ 1/3 lên 2/3 thì thể tích của thiết bị tăng lên bao nhiêu lần?

Cho biết phương trình tỉ lượng và phương trình tốc độ của phản ứng như sau:

**Bài 7.14**

Chất phản ứng A được dẫn vào thiết bị PFR với tốc độ nạp liệu là 10 kmol/giờ là nguyên liệu của phản ứng dime hóa nhiệt ở 946°C.

Biết rằng phản ứng dime hóa ở điều kiện này là một phản ứng cơ bản:



trong đó:

$$k_1 = 2 \frac{\text{mol}}{\text{lit} \times \text{giờ} \times \text{atm}^2}$$

$$K_p = 1 \text{ atm}^{-1}$$

Hãy xác định độ chuyển hóa của phản ứng tại điều kiện cân bằng và thể tích của thiết bị, cho biết khi nguyên liệu chỉ chứa chất A tinh khiết được nạp vào thiết bị tại áp suất 10 atm thì độ chuyển hóa của phản ứng trong thiết bị này là 50%.

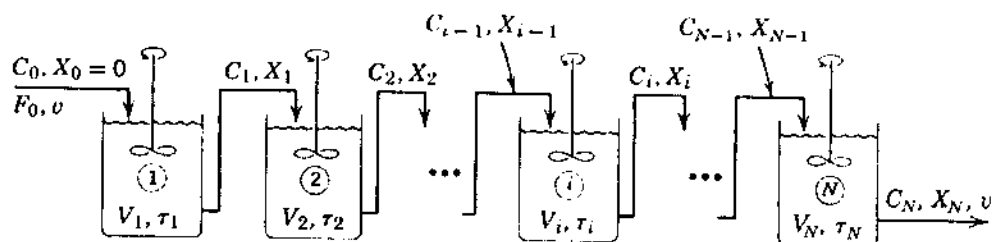


# CHƯƠNG 8

## HỆ THỐNG CÁC THIẾT BỊ PHẢN ỨNG

### 8.1. Hệ thống các thiết bị IMR

#### 8.1.1. Hệ thống các thiết bị IMR có thể tích bằng nhau mắc nối tiếp



**Hình 8.1:** Hệ thống các thiết bị IMR mắc nối tiếp.

Xét hệ bao gồm  $N$  thiết bị IMR có thể tích bằng nhau mắc nối tiếp. Gọi  $X_1, X_2, \dots, X_N$  là độ chuyển hóa của phản ứng sau khi đi ra khỏi thiết bị 1, 2, ...,  $N$ .

- Đánh giá định lượng một hệ thống gồm  $N$  thiết bị IMR có thể tích bằng nhau mắc nối tiếp.

Xét các phản ứng có  $\epsilon = 0$

- ❖ Phản ứng bậc 1:

Phương trình cân bằng vật chất viết cho cấu tử A đối với thiết bị thứ  $i$ :

$$\tau_i = \frac{C_{A0} V_i}{F_{A0}} = \frac{V_i}{\dot{V}} = \frac{C_{A0} (X_i - X_{i-1})}{(-r_{Ai})} \quad (8.1)$$

$$\Leftrightarrow \tau_i = \frac{C_{A0} \left( \frac{C_{A0} - C_{Ai}}{C_{A0}} - \frac{C_{A0} - C_{Ai-1}}{C_{A0}} \right)}{kC_i} \quad (\text{do } \varepsilon=0)$$

$$\Leftrightarrow \tau_i = \frac{C_{A0} \left( \left( 1 - \frac{C_{Ai}}{C_{A0}} \right) - \left( 1 - \frac{C_{Ai-1}}{C_{A0}} \right) \right)}{kC_i} = \frac{C_{Ai-1} - C_{Ai}}{kC_{Ai}}$$

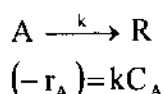
$$\Rightarrow \frac{C_{Ai-1}}{C_{Ai}} = 1 + k\tau_i \quad (8.2)$$

Đối với hệ gồm N thiết bị có thể tích bằng nhau thì thời gian lưu trong từng thiết bị là như nhau (bằng  $\tau/N$ ) nên:

$$\frac{C_{A0}}{C_{AN}} = \frac{1}{1 - X_{AN}} = \frac{C_{A0}}{C_{A1}} \times \frac{C_{A1}}{C_{A2}} \times \dots \times \frac{C_{AN-1}}{C_{AN}} = \left( 1 + k \frac{\tau}{N} \right)^N \quad (8.3)$$

**Ví dụ 8.1:** Tính thời gian lưu của thiết bị PFR, thiết bị IMR và hệ gồm hai thiết bị IMR có thể tích bằng nhau mắc nối tiếp (hệ cascade).

Biết rằng độ chuyển hóa của phản ứng là 0,99 và phương trình tỉ lệ và phương trình tốc độ phản ứng như sau:



Thời gian lưu của hệ sẽ thay đổi như thế nào nếu hệ gồm 10 bình, n bình có thể tích bằng nhau?

#### Lời giải

❖ Phản ứng bậc 1:

• Đối với PFR:

$$\tau = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A}$$

$$\tau = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{k C_{A0} (1 - X_A)}$$

$$\tau = \int_0^{0,99} \frac{dX_A}{k (1 - X_A)}$$

$$\tau = \frac{1}{k} \ln \frac{1}{1 - X_A} \Big|_0^{0,99} = \frac{2 \ln 10}{k}$$

- Đối với thiết bị IMR:

$$\tau = C_{A0} \frac{X_A}{(-r_A)} = C_{A0} \frac{X_A}{k C_{A0} (1 - X_A)} = \frac{1}{k} \frac{X_A}{1 - X_A} = \frac{99}{k}$$

- Đối với hệ cascade:

✗ Đối với hệ cascade gồm hai thiết bị IMR có thể tích bằng nhau:

$$\tau_1 = C_{A0} \frac{X_{A1}}{(-r_{A1})} = C_{A0} \frac{(C_{A0} - C_{A1}) / C_{A0}}{k C_{A1}}$$

$$\Rightarrow \tau_1 = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{k C_{A1}}$$

$$\tau_2 = \frac{C_{A1} - C_{A2}}{k C_{A2}}$$

Vì hai thiết bị có thể tích bằng nhau mắc nối tiếp nên thời gian lưu của hai thiết bị là bằng nhau (bằng một nửa thời gian lưu của hệ hai thiết bị  $\tau$ ) nên:

$$\frac{C_{A0} - C_{A1}}{k C_{A1}} = \frac{C_{A1} - C_{A2}}{k C_{A2}} = \frac{\tau}{2}$$

$$\Leftrightarrow \frac{k(C_{A0} - C_{A1})}{k C_{A1}} = \frac{k(C_{A1} - C_{A2})}{k C_{A2}} = \frac{k\tau}{2}$$

$$\frac{C_{A0}}{C_{A1}} = \frac{C_{A1}}{C_{A2}} = \left( k \frac{\tau}{2} + 1 \right)$$

$$\Rightarrow \frac{C_{A0}}{C_{A2}} = \frac{C_{A0}}{C_{A1}} \times \frac{C_{A1}}{C_{A2}} = \left(k \frac{\tau}{2} + 1\right)^2$$

Độ chuyển hóa của phản ứng là 0,99 nên:

$$\frac{C_{A0}}{C_{A0}(1-0,99)} = \left(k \frac{\tau}{2} + 1\right)^2$$

$$\Rightarrow k \frac{\tau}{2} + 1 = \sqrt{\left(\frac{1}{1-0,99}\right)} = 10$$

$$\Rightarrow \tau = \frac{18}{k}$$

✘ Khi trong hệ cascade gồm n bình có thể tích như nhau:

Đối với phản ứng bậc một thực hiện trong một hệ cascade gồm n bình IMR ta cần chứng minh biểu thức:

$$\frac{C_{A0}}{C_{An}} = \left(1 + k \frac{\tau}{n}\right)^n \quad (*)$$

Chứng minh theo phương pháp quy nạp:

- Với  $n = 1$

$$\frac{\tau}{1} = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{k C_{A1}}$$

$$\Leftrightarrow \frac{C_{A0}}{C_{A1}} = \left(1 + k \frac{\tau}{1}\right)$$

Như vậy, biểu thức (\*) được nghiệm đúng.

- Với  $n = 2$

$$\frac{\tau}{2} = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{k C_{A1}} = \frac{C_{A1} - C_{A2}}{k C_{A2}}$$

$$\Rightarrow C_{A1} = \frac{C_{A0}}{\left(1 + \frac{\tau}{2} k\right)}$$

$$\Rightarrow C_{A2} = \frac{C_{A1}}{\left(1 + \frac{\tau}{2} k\right)}$$

$$\Rightarrow C_{A2} = \frac{C_{A0}}{\left(1 + \frac{\tau}{2} k\right)^2}$$

Như vậy, biểu thức (\*) cũng được nghiệm đúng.

- Giả sử biểu thức trên nghiệm đúng với  $n = m$ .

$$\frac{C_{A0}}{C_{Am}} = \left(1 + k \frac{\tau}{m}\right)^m$$

- Ta chứng minh biểu thức trên cũng nghiệm đúng với  $n = m + 1$

Ta có:

$$\frac{C_{A0}}{C_{Am}} = \left(1 + k \frac{\tau}{m+1}\right)^m \quad (a)$$

Chú ý rằng trong hệ lúc này có  $m+1$  thiết bị khuấy lý tưởng liên tục bằng nhau mắc nối tiếp với nhau nên có  $\tau_1 = \tau_2 = \dots = \tau_{m+1} = \tau/m+1$

Mặt khác,

$$\frac{C_{Am}}{C_{Am+1}} = \left(1 + k \frac{\tau}{m+1}\right) \quad (b)$$

Từ các biểu thức (a) và (b) suy ra:

$$\frac{C_{A0}}{C_{Am+1}} = \left(1 + k \frac{\tau}{m+1}\right)^{m+1}$$

Như vậy, biểu thức (\*) đã được chứng minh.

Do đó:

$$C_{A2} = \frac{C_{A0}}{\left(1 + k \frac{\tau}{10}\right)^2}$$

$$C_{A10} = \frac{C_{A0}}{\left(1 + k \frac{\tau}{10}\right)^{10}}$$

$$\Rightarrow \left(1 + k \frac{\tau}{10}\right) = \sqrt[10]{\frac{C_{A0}}{C_{A10}}}$$

$$\Rightarrow \sqrt[10]{100} = 100^{\frac{1}{10}} = 1,585$$

$$\Rightarrow \tau = \frac{5,85}{k}$$

- Xét bài toán hệ gồm  $n$  bình có thể tích bằng nhau mắc nối tiếp:

$$\frac{C_{A0}}{C_{An}} = \left(1 + k \frac{\tau}{n}\right)^n$$

Lấy logarit biểu thức trên:

$$\ln \frac{C_{A0}}{C_{An}} = n \ln \left(1 + \frac{k\tau}{n}\right)$$

Khi số bình phản ứng là vô cùng lớn:  $n \rightarrow \infty$  thì  $(k\tau/n) \rightarrow 0$  nên:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n \ln \left(1 + \frac{k\tau}{n}\right) = n \frac{k\tau}{n} = k\tau$$

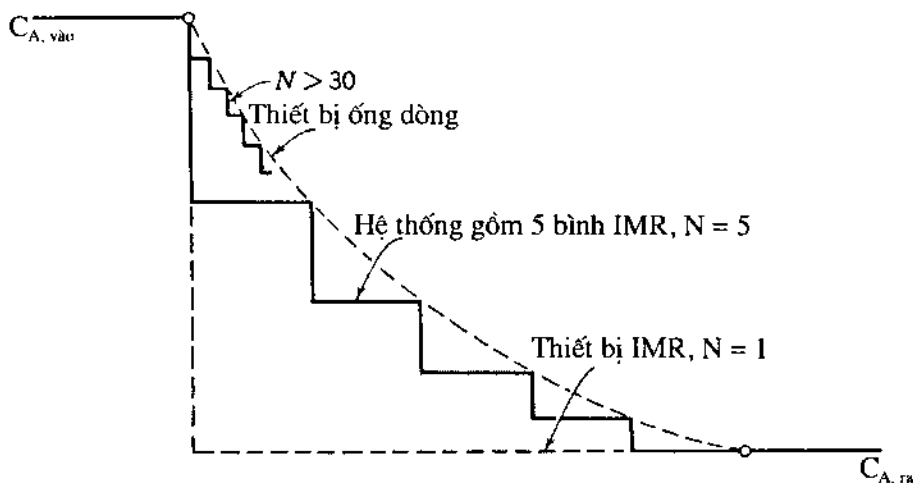
Lưu ý  $\lim_{x \rightarrow 0} \ln(1+x) = x$

Suy ra:

$$k\tau = \ln \frac{C_{A0}}{C_{An}} = \ln 100 = 2 \ln 10$$

$$\Rightarrow \tau = \frac{2 \ln 10}{k}$$

Như vậy, khi hệ cascade có số bình phản ứng vô cùng lớn thì thời gian lưu của hệ bằng với thời gian lưu của thiết bị ống dòng.



**Hình 8.2:** Biểu diễn nồng độ qua hệ khuấy N giai đoạn so với buồng phản ứng dòng đơn.

### 8.1.2. Hệ thống các thiết bị IMR có thể tích khác nhau

Đối với hệ thống gồm các thiết bị IMR có thể tích khác nhau thì bài toán đặt ra là:

- Tìm độ chuyển hóa của phản ứng tiến hành trong hệ thống. Xét một hệ gồm các thiết bị IMR có thể tích khác nhau mắc nối tiếp với nhau:
- Đối với thiết bị thứ nhất:

$$\tau_1 = \frac{V_1}{\dot{V}} = \frac{C_0 - C_1}{(-r)_1} \quad (8.4)$$

hoặc:

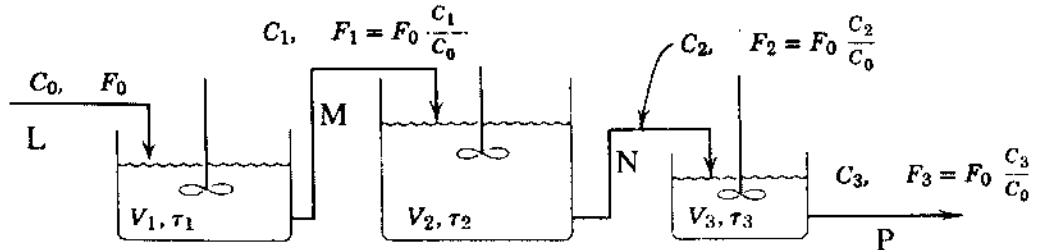
$$-\frac{1}{\tau_1} = \frac{(-r)_1}{C_1 - C_0} \quad (8.5)$$

Một cách tương tự, đối với thiết bị thứ i:

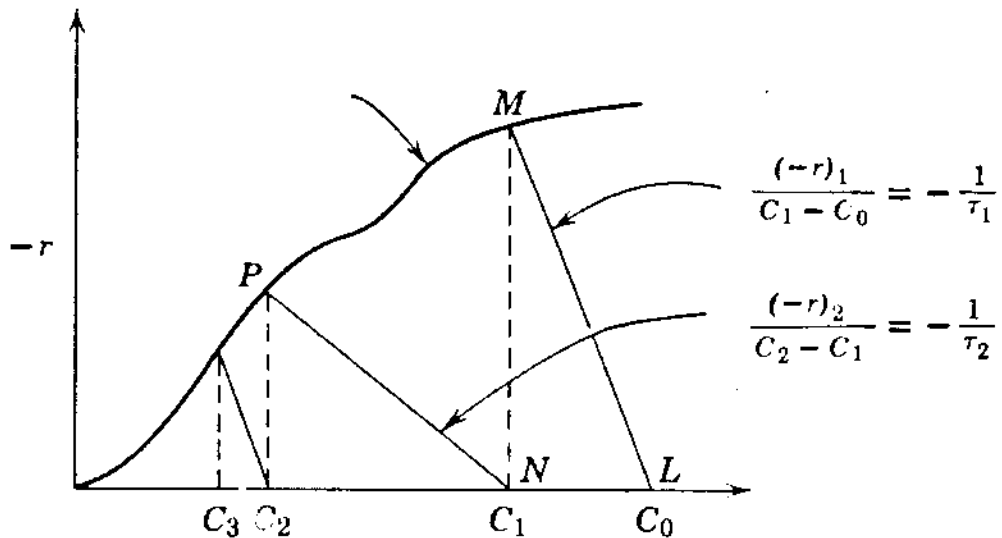
$$-\frac{1}{\tau_i} = \frac{(-r)_i}{C_i - C_{i-1}} \quad (8.6)$$

Ví dụ 8.2

Xét một hệ gồm 3 thiết bị IMR có thể tích khác nhau mắc nối tiếp với nhau



**Hình 8.3:** Ký hiệu cho các buồng phản ứng IMR không cùng cỡ mắc nối tiếp với nhau.



**Hình 8.4.** Xác định thành phần của hệ IMR mắc nối tiếp bằng phương pháp đồ thị.

- Đối với thiết bị thứ nhất: Nồng độ chất phản ứng trong hỗn hợp nguyên liệu ban đầu là  $C_0$  đã biết ứng với điểm L. Mặt khác, từ phương trình (8.4) tìm được điểm M và từ điểm M suy ra tốc độ phản ứng và nồng độ chất phản ứng khi đi ra khỏi thiết bị thứ nhất.



Lập lại một cách tương tự đối với các thiết bị tiếp theo sẽ tính được tốc độ phản ứng và nồng độ chất phản ứng khi đi ra khỏi thiết bị cuối cùng và từ đó xác định được độ chuyển hóa của phản ứng tiến hành trong hệ.

### Ví dụ 8.3

Xét một phản ứng tự xúc tác  $A \rightarrow R$  có phương trình tốc độ phản ứng như sau:

$$(-r_A) = 0,001 C_A C_R \quad \left( \frac{\text{mol}}{\text{l} \times \text{s}} \right)$$

Biết rằng: tốc độ nạp liệu là 1,5 lit/s và nồng độ cấu tử A trong hỗn hợp nguyên liệu là 10 mol/l ( $C_{A0} = 10 \text{ mol/l}$ ).

Nếu tiến hành phản ứng trong một hệ gồm 4 bình khuấy lí tưởng tổng thể tích 400l thì cách sắp xếp nào cho độ chuyển hóa đạt được cao nhất? Hãy đưa ra sơ đồ sắp xếp hợp lý đối với hệ thống và xác định nồng độ cấu tử A đi ra khỏi thiết bị:

### Lời giải

Xét biểu thức tính tốc độ phản ứng:

$$(-r_A) = 0,001 C_A C_R \quad \left( \frac{\text{mol}}{\text{l} \times \text{s}} \right)$$

Đối với các số dương x, y thì theo bất đẳng thức Cauchy:

$$xy \leq \frac{x^2 + y^2}{2}$$

Dấu bằng đạt được khi  $x = y$ .

Như vậy, tốc độ phản ứng đạt cực đại khi  $C_A = 10 - C_A \Rightarrow C_A = 5 \text{ (mol/l)}$

Vậy:

$$-r_{A,\max} = 0,001 \times 5 \times 5 = 0,025 \text{ mol/l} \cdot \text{s}$$

Thời gian lưu của phản ứng trong thiết bị khuấy lý tưởng liên tục được xác định như sau:

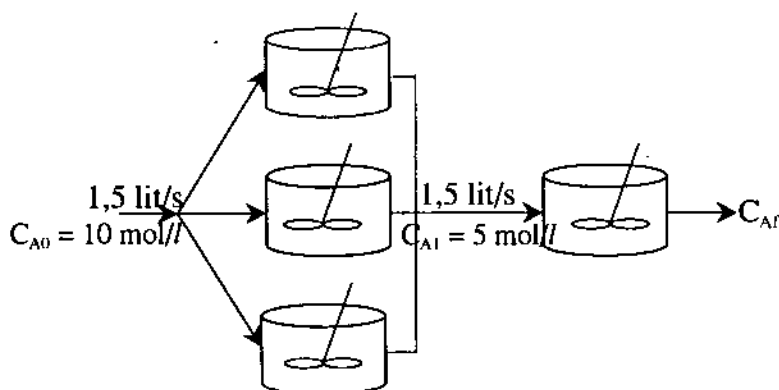
$$\tau = \frac{10-5}{-r_{A,\max}} = \frac{5}{0,025} = 200 \text{ s}$$

Mặt khác, khi quá trình phản ứng được tiến hành ở tốc độ nạp liệu là 1,5 (l/s):

$$\tau = \frac{V}{\dot{V}} = \frac{V}{1,5} = 200 \text{ s}$$

Suy ra:  $V = 300 \text{ lit}$ .

Vậy hệ thống thiết bị phản ứng được thiết kế như hình 8.5.



**Hình 8.5:** Hệ thống gồm 4 bình phản ứng IMR.

Như vậy nồng độ của cấu tử đi ra sẽ được xác định như sau:

$$\tau = \frac{V'}{\dot{V}} = \frac{100}{1,5}$$

Mặt khác:

$$\tau = \frac{5 - C_{Af}}{0,001 C_{Af} (10 - C_{Af})}$$

Suy ra

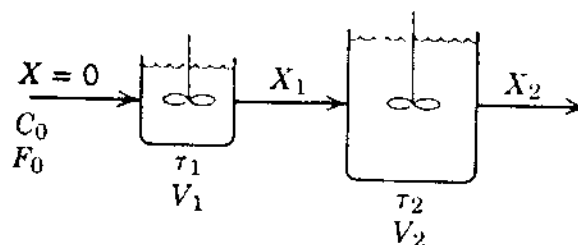
$$C_{Af} = 3,486 \text{ mol/l}.$$

**\* Tìm phương án thiết kế hệ thống để đạt được một độ chuyển hoá cho trước**

Xét bài toán tìm tổng thể tích nhỏ nhất của hai thiết bị IMR mắc nối tiếp thành một hệ để đạt được độ chuyển hoá cho trước.

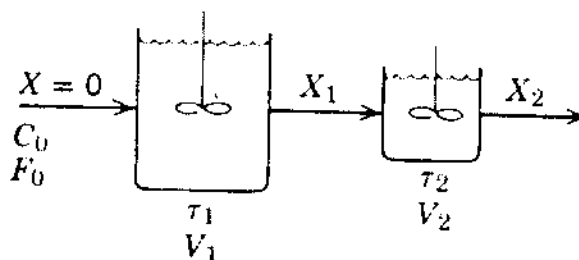
Đối với hệ này có hai phương án sắp xếp:

- Phương án thứ nhất:



**Hình 8.6:** Hệ thống gồm hai bình phản ứng IMR mắc nối tiếp sắp xếp theo phương án thứ nhất.

- Phương án thứ hai:



**Hình 8.7:** Hệ thống gồm hai bình phản ứng IMR mắc nối tiếp sắp xếp theo phương án thứ hai.

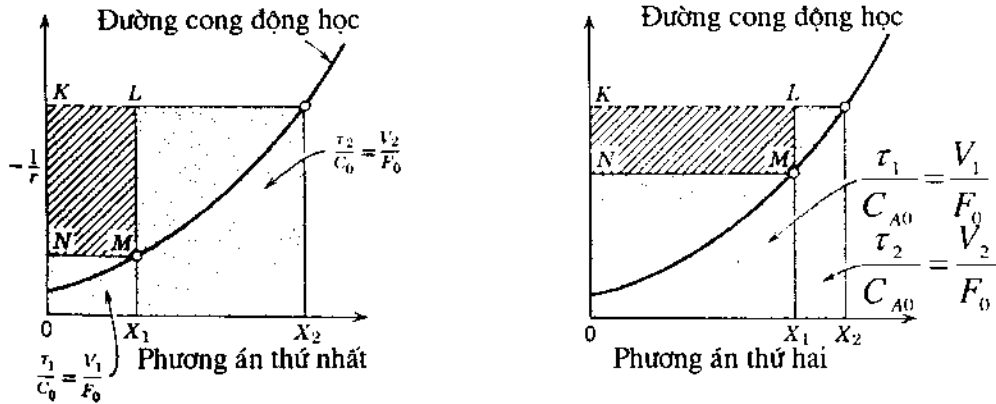
- Đối với thiết bị thứ nhất:

$$\frac{\tau_1}{C_0} = \frac{X_1}{(-r)_1}$$

- Đối với thiết bị thứ hai:

$$\frac{\tau_2}{C_0} = \frac{X_2 - X_1}{(-r)_2}$$

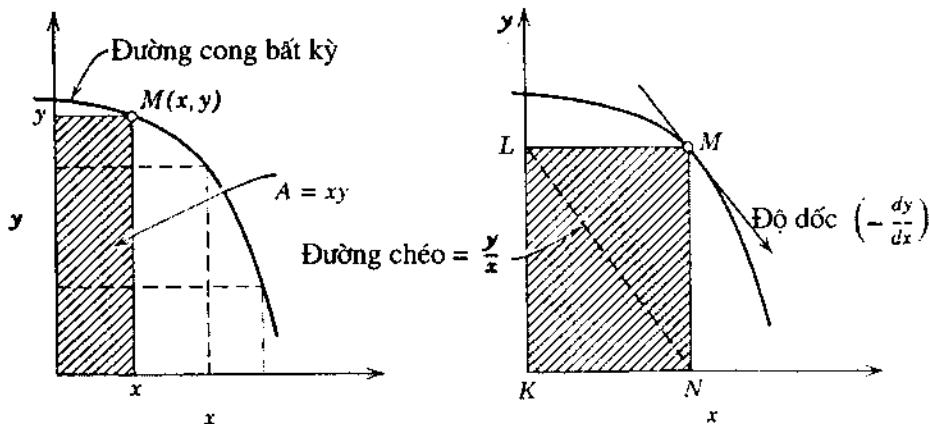
Mối tương quan giữa các tỉ số được biểu diễn qua hình 8.8 sau:



Hình 8.8: Đồ thị biểu diễn mối tương quan giữa các tỉ số.

Hình 8.8 cho thấy tổng thể tích của các thiết bị trong hệ thống càng nhỏ khi hình chữ nhật KLMN có diện tích càng lớn. Vì vậy, cần giải quyết bài toán là tìm  $X_1$  (hoặc điểm M trên đường cong) sao cho diện tích của hình chữ nhật KLMN là lớn nhất.

❖ Tìm điều kiện để hình chữ nhật KLMN có diện tích lớn nhất:



Hình 8.9: Tìm diện tích hình chữ nhật cực đại bằng đồ thị.

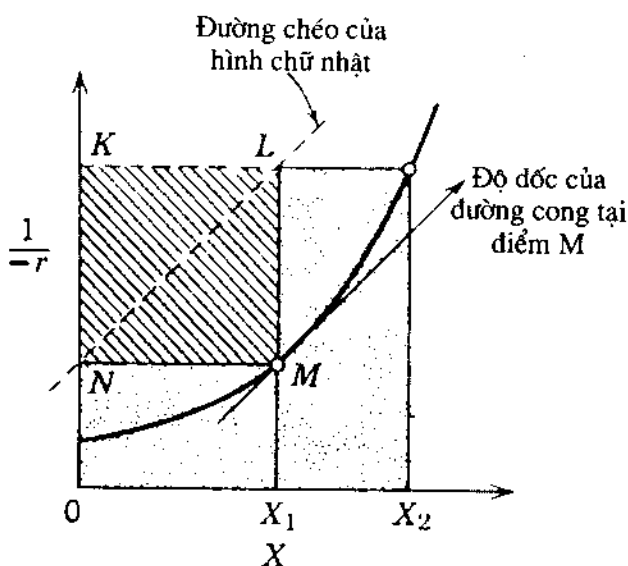
Giả sử điểm M có toạ độ  $(x, y)$  thì diện tích của hình chữ nhật  $A = xy$

Diện tích của hình chữ nhật đạt cực trị khi:

$$\begin{aligned} dA &= 0 \\ \Leftrightarrow ydx + xdy &= 0 \\ \Leftrightarrow -\frac{dy}{dx} &= \frac{y}{x} \end{aligned}$$

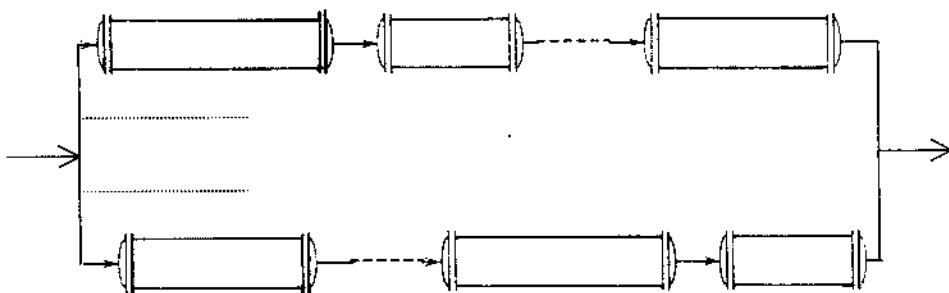
Điều này có nghĩa là diện tích hình chữ nhật sẽ đạt cực đại khi điểm M nằm tại vị trí sao cho độ dốc của đường cong tại điểm M bằng với độ dốc của đường chéo NL của hình chữ nhật. Điểm này phụ thuộc vào hình dạng của đường cong động học và có thể tìm được một số điểm thỏa mãn điều kiện trên. Tuy nhiên, đối với các phản ứng tuân theo cơ chế động học của phản ứng bậc  $n$  với  $n > 0$  thì chỉ có một điểm thỏa mãn điều kiện trên.

Đối với bài toán đặt ra thì vị trí điểm M để tổng thể tích của hai thiết bị là nhỏ nhất như sau (xem hình 8.10):



**Hình 8.10:** Ứng dụng tìm diện tích hình chữ nhật cực đại để xác định độ chuyển hóa trung gian và kích thước tối ưu cho hệ hai buồng khuấy nối tiếp.

## 8.2. Hệ thống các thiết bị PFR



**Hình 8.11:** Hệ thống gồm các ống dòng mắc nối tiếp và song song với nhau.

Xét một hệ gồm  $N$  PFR mắc thành dãy nối tiếp, gọi  $X_1, X_2, \dots, X_N$  là độ chuyển hóa của  $A$  khi rời khỏi thiết bị phản ứng 1, 2, ...,  $N$ . Dựa trên cơ sở cân bằng vật chất đối với tốc độ nạp liệu  $A$  đối với thiết bị phản ứng 1 suy ra biểu thức đối với thiết bị phản ứng thứ  $i$ :

$$\begin{aligned} \frac{V}{F_{AO}} &= \int_{x_{Ao}}^{x_{Af}} \frac{dX}{-r_A} \\ \Rightarrow \frac{V_i}{F_0} &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{dX}{-r} \end{aligned} \quad (8.7)$$

❖ Đối với một hệ gồm  $N$  thiết bị PFR mắc thành dãy nối tiếp

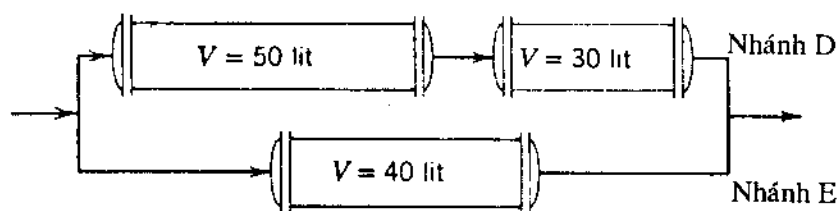
$$\begin{aligned} \frac{V}{F_0} &= \frac{\sum_{i=1}^N V_i}{F_0} = \frac{V_1 + V_2 + \dots + V_N}{F_0} \\ \Leftrightarrow \frac{V}{F_0} &= \int_{x_0=0}^{x_1} \frac{dX}{-r} + \int_{x_1}^{x_2} \frac{dX}{-r} + \dots + \int_{x_{N-1}}^{x_N} \frac{dX}{-r} \\ \Leftrightarrow \frac{V}{F_0} &= \int_0^{x_N} \frac{dX}{-r} \end{aligned} \quad (8.8)$$

Như vậy, hệ gồm N PFR mắc nối tiếp với thể tích tổng cộng là V sẽ cho độ chuyển hóa đúng bằng 1 PFR có thể tích V.

- ❖ Đối với hệ thống PFR mắc song song hay mắc phức hợp nối tiếp - song song, có thể xem toàn bộ hệ thống như là 1 thiết bị PFR với thể tích bằng tổng thể tích của các PFR trong hệ nếu như dòng nguyên liệu được phân bố theo cách để các dòng sản phẩm đi ra từ các dây mắc song song có thành phần như nhau. Như vậy, đối với hệ mắc song song thì  $V/F$  hay  $\tau$  cần phải là như nhau đối với mọi dây. Mọi cách nạp liệu khác đều kém hiệu quả hơn.

#### Ví dụ 8.4

Hệ thống PFR được thiết kế bao gồm 3 thiết bị PFR mắc thành hai nhánh song song. Nhánh D có một thiết bị PFR với thể tích là 50 lit mắc nối tiếp với một thiết bị PFR thứ hai có thể tích là 30 lit. Nhánh E có một thiết bị PFR có thể tích là 40 lit. Hãy xác định tỉ lệ tốc độ nạp liệu giữa hai nhánh D và E.



**Hình 8.12:** Hệ thống gồm 3 ống dòng mắc nối tiếp và song song với nhau.

#### Lời giải

Nhánh D gồm hai thiết bị phản ứng là  $PFR_1$  và  $PFR_2$  mắc nối tiếp. Do đó có thể xem là 1 thiết bị PFR:

$$V_D = 50 \text{ lit} + 30 \text{ lit} = 80 \text{ lit}$$

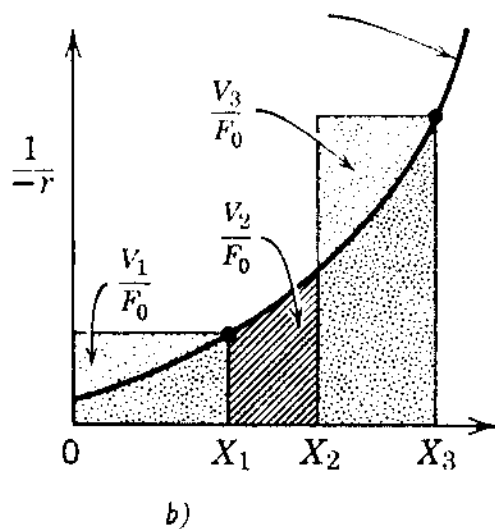
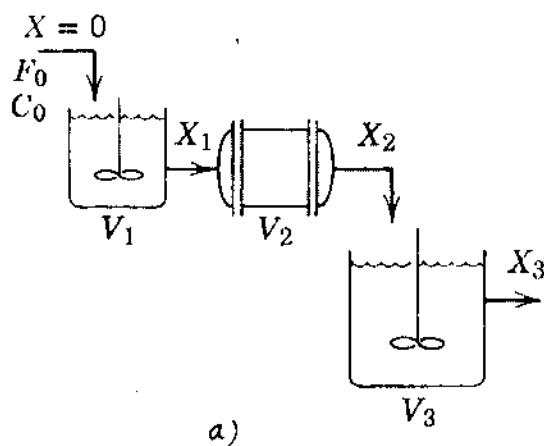
Đối với hệ thống các thiết bị phản ứng mắc song song thì độ chuyển hoá trong cả hai dây D và E là như nhau nên:

$$\left( \frac{V}{F} \right)_D = \left( \frac{V}{F} \right)_E$$

$$\Rightarrow \frac{F_D}{F_E} = \frac{V_D}{V_E} = \frac{80}{40} = 2$$

### 8.3. Hệ thống gồm các thiết bị IMR và PFR

Xét một hệ thống gồm hai thiết bị IMR và một thiết bị PFR mắc nối tiếp với nhau như hình 8.13 dưới đây:



**Hình 8.13:** Hệ thống gồm các bình phản ứng IMR và các ống dòng mắc nối tiếp.



- Đối với thiết bị IMR thứ nhất:

$$\frac{V_1}{F_0} = \frac{X_1 - X_0}{(-r)_1} \quad (8.9)$$

- Đối với thiết bị PFR:

$$\frac{V_2}{F_0} = \int_{X_1}^{X_2} \frac{dX}{(-r)_2} \quad (8.10)$$

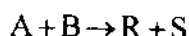
- Đối với thiết bị IMR thứ hai:

$$\frac{V_3}{F_0} = \frac{X_3 - X_2}{(-r)_3} \quad (8.11)$$

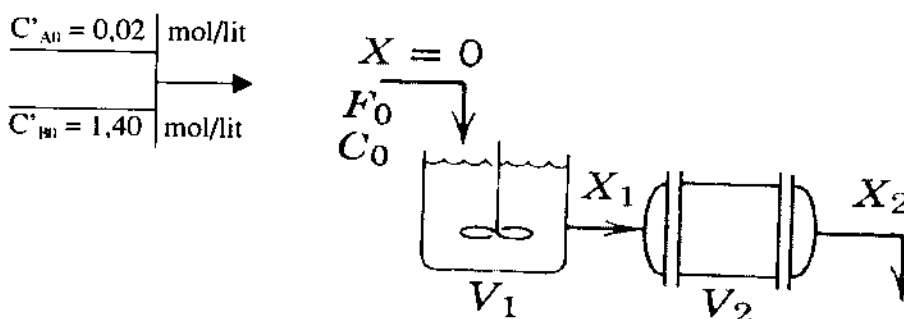
Mối tương quan giữa chúng được biểu diễn qua hình 8.13b.

### Ví dụ 8.5

Một phản ứng pha lỏng đồng thể được tiến hành trong điều kiện đẳng nhiệt có phương trình phản ứng như sau:



Nguyên liệu đầu gồm các chất A và B được đưa vào bình phản ứng IMR (có thể tích 4 lit) với lưu lượng dòng như nhau. Dòng thứ nhất chứa chất A có nồng độ 0,02 mol/lit, dòng thứ hai chứa chất B có nồng độ là 1,4 mol/lit. Sau khi rời khỏi thiết bị IMR hỗn hợp phản ứng được đưa vào thiết bị PFR (có thể tích 16 lit). Nồng độ của R sau khi rời khỏi thiết bị IMR là 0,002 mol/lit.



Hình 8.14: Hệ thống gồm bình phản ứng IMR và 1 ống dòng mắc nối tiếp với nhau.

Cho biết phản ứng trên là phản ứng cơ bản, hãy xác định nồng độ của chất R sau khi rời khỏi thiết bị PFR và xác định độ chuyển hóa  $X_A$

Lời giải

Vì A và B cùng được đưa vào IMR với lưu lượng dòng như nhau nên:

$$C_{AO} = \frac{0,02}{2} = 0,01 \text{ mol/l}$$

$$C_{BO} = \frac{1,4}{2} = 0,7 \text{ mol/l}$$

Suy ra:

$$C_{AO} = \frac{1}{70} C_{BO}$$

Như vậy có thể coi nồng độ của chất B là không thay đổi và phản ứng là bậc 1 đối với A.

- Đối với thiết bị IMR:

$$k\tau_{IMR} = \frac{C_{AO} - C_{A1}}{C_{A1}} = \frac{0,01 - (0,01 - 0,002)}{(0,01 - 0,002)} = \frac{1}{4}$$

- Đối với thiết bị PFR:

Do  $V_{PFR} = 16 \text{ lit} = 4V_{IMR}$  nên:

$$kt_{PFR} = 4(k\tau_{IMR}) = 4\left(\frac{1}{4}\right) = 1$$

$$\int_{0,008}^{C_{A2}} \frac{dC_A}{C_A} = \ln \frac{0,008}{C_{A2}} = 1$$

$$\Rightarrow C_{A2} = 0,00293$$

Suy ra:

$$C_{R2} = 0,01 - 0,0029 = 0,0061 \text{ mol/l}$$

$$X_A = \frac{C_{AO} - C_{A2}}{C_{AO}}$$

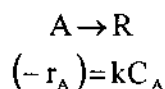
$$X_A = \frac{0,01 - 0,0029}{0,01} = 69\%$$

## BÀI TẬP CHƯƠNG 8

### Bài 8.1

Một phản ứng được tiến hành trong một hệ cascade gồm hai thiết bị phản ứng mắc nối tiếp có thể tích lần lượt là  $V_1$  và  $V_2$ .

Biết rằng phương trình tỉ lượng và phương trình tốc độ của phản ứng như sau:



Hãy chứng minh rằng thời gian lưu của tác nhân phản ứng nói trên sẽ nhỏ nhất khi thể tích của hai bình phản ứng là như nhau.

### Bài 8.2

Người ta dự định thiết kế một hệ cascade từ hai bình phản ứng IMR có thể tích khác nhau, để tiến hành sản xuất một sản phẩm sinh ra từ phản ứng tuân theo quy luật động học của phản ứng bậc một thì cần phải lắp các thiết bị đó theo thứ tự nào?

### Bài 8.3

Người ta tiến hành nghiên cứu động học của phản ứng phân huỷ chất A ở pha khí trong một hệ cascade gồm hai bình IMR trong đó thể tích của bình thứ hai gấp đôi bình thứ nhất. Nồng độ chất A trong nguyên liệu đầu  $C_{A0}$ , khi rời thiết bị thứ nhất  $C_{A1}$  và thứ hai  $C_{A2}$  lần lượt là 1 mol/lit, 0,5 mol/lit và 0,25 mol/lit.

Biết rằng khi tốc độ nạp liệu là 1 molA/lit thì thời gian lưu trong thiết bị thứ nhất là 96 s.

Hãy tìm phương trình động học của phản ứng.

**Bài 8.4**

Chất A phân hủy theo quy luật động học của phản ứng bậc một:



Có hai dòng nạp nguyên liệu:

|               |                              |                            |
|---------------|------------------------------|----------------------------|
| Dòng thứ nhất | $C_{A0} = 1 \text{ mol/lit}$ | $F_{A0} = 1 \text{ mol/s}$ |
| Dòng thứ hai  | $C_{A0} = 2 \text{ mol/lit}$ | $F_{A0} = 2 \text{ mol/s}$ |

Người ta dự định tiến hành phản ứng sao cho nồng độ chất A ở đầu ra là 0,25 mol/l. Nếu như dòng nguyên liệu thứ nhất được nạp vào thiết bị PFR thứ nhất có thể tích  $V_1$  thì thiết bị PFR thứ hai phải có thể tích là bao nhiêu để khi nạp dòng nguyên liệu thứ hai vào nó vẫn nhận được nồng độ chất A ở lối ra là 0,25 mol/l.

**Bài 8.5**

Một phản ứng cơ bản:  $A + B \rightarrow R + S$  được tiến hành trong một hệ thống gồm 1 thiết bị IMR mắc nối tiếp với 1 thiết bị PFR. Nồng độ của chất B trong nguyên liệu đầu là rất lớn nên có thể coi phản ứng là bậc một đối với chất A. Nếu thay đổi thứ tự lắp đặt các thiết bị trong hệ thống trên thì độ chuyển hoá của phản ứng này ở đầu ra của thiết bị có thay đổi hay không?

**Bài 8.6**

Một dòng nguyên liệu lỏng chứa chất A (nồng độ 4 molA/lit) được dẫn qua một hệ thống gồm một thiết bị IMR mắc nối tiếp với một thiết bị PFR. Hãy tính nồng độ chất A ở lối ra của thiết bị PFR nếu nồng độ chất A trong hỗn hợp sản phẩm khi đi ra khỏi thiết bị IMR là 1 mol/lit. Biết rằng phản ứng trên là bậc hai và thể tích của thiết bị PFR gấp 3 lần thể tích thiết bị IMR.

**Bài 8.7**

Một dòng nguyên liệu chứa chất A nồng độ 125 mol/m<sup>3</sup> (tham gia trong phản ứng  $A \rightarrow R$ ) được dẫn qua một hệ gồm 4 thiết bị IMR có thể tích bằng nhau mắc nối tiếp với nhau. Thời gian lưu của cả hệ là 2 phút và nồng độ chất A ở đầu ra của các thiết bị lần lượt là 18; 5; 2 và 1 mol/lit. Khi thiết bị được thay thế

bằng PFR thì thời gian lưu cần thiết là bao nhiêu để thu được nồng độ đầu ra như trên.

### **Bài 8.8**

Người ta dự định làm giảm nồng độ chất phóng xạ Xe-138 (thời gian bán hủy là 14 phút) bằng cách dẫn vào một hệ thống gồm hai thiết bị IMR mắc nối tiếp với nhau. Thời gian lưu trong mỗi thiết bị phản ứng là 2 tuần đối với mỗi bình phản ứng.

Nếu thay thế hệ thống trên bằng thiết bị PFR thời gian lưu của phản ứng trong thiết bị này phải là bao nhiêu để nồng độ chất phóng xạ Xe ở đầu ra của thiết bị bằng với nồng độ chất phóng xạ Xe ở đầu ra của hệ thống là tương đương nhau?

### **Bài 8.9**

Người ta dự định xử lý một nguyên liệu lỏng chứa 1 mol chất A/lit với tốc độ 10 lit/phút tới độ chuyển hóa 99%. Phương trình tỉ lượng và phương trình động học của phản ứng như sau:

$$A \rightarrow R ; \quad (-r_A) = \frac{C_A}{0,2 + C_A} \quad \left( \frac{\text{mol}}{\text{lit} \times \text{phút}} \right)$$

Người ta dự định tiến hành phản ứng này trong một hệ thống gồm bình phản ứng IMR mắc nối tiếp. Hãy đưa ra sơ đồ thiết kế để tổng thể tích của cả hệ là nhỏ nhất và tính thể tích của từng bình phản ứng trong trường hợp đó.

### **Bài 8.10**

Một enzyme E hoạt động như một chất xúc tác đồng thể trong phản ứng phân hủy một chất độc hại A có trong rác thải công nghiệp thành các chất không độc. Người ta tiến hành phản ứng trên trong một thiết bị IMR tại một nồng độ enzyme E cố định và thu được số liệu động học như sau:

|                              |     |   |    |   |    |    |    |    |
|------------------------------|-----|---|----|---|----|----|----|----|
| $C_{A0}$ mmol/m <sup>3</sup> | 2   | 5 | 6  | 6 | 11 | 14 | 16 | 24 |
| $C_A$ mmol/m <sup>3</sup>    | 0,5 | 3 | 1  | 2 | 6  | 10 | 8  | 4  |
| $\tau$ (s)                   | 30  | 1 | 50 | 8 | 4  | 20 | 20 | 4  |

Người ta dự định xử lý nước thải chứa chất A có nồng độ  $10 \text{ mmol/m}^3$  bằng hệ thống gồm 1 thiết bị IMR và 1 thiết bị PFR với tốc độ  $100 \text{ lit/phút}$  tới độ chuyển hóa 90% với nồng độ enzyme là  $C_E$ .

Hãy đưa ra sơ đồ sắp xếp sao cho tổng thể tích của hệ thống phản ứng là nhỏ nhất và tính thể tích của từng bình phản ứng theo cách sắp xếp đó.

## CHƯƠNG 9

# THIẾT BỊ PHẢN ỨNG QUAY VÒNG VÀ PHẢN ỨNG TỰ XÚC TÁC

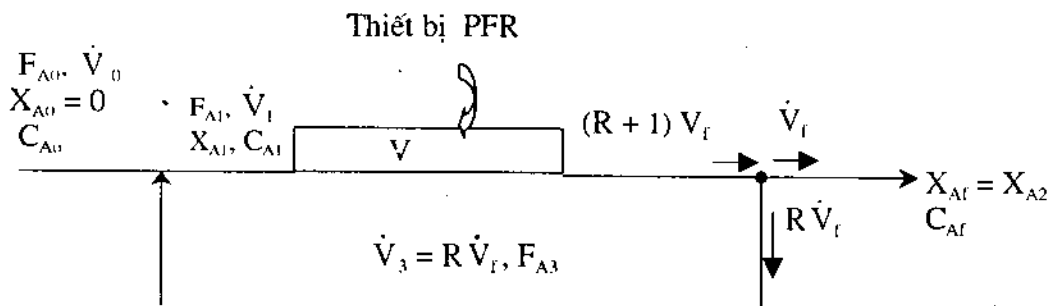
### 9.1. Thiết bị phản ứng quay vòng

Trong từng hoàn cảnh cụ thể, để tăng hiệu quả kinh tế có thể quay vòng phân nguyên liệu chưa tham gia phản ứng trở lại thiết bị phản ứng. Hệ số quay vòng  $R$  được định nghĩa như sau:

$$R = \frac{\text{Thể tích của dòng chất quay vòng trở lại thiết bị phản ứng}}{\text{Thể tích của dòng chất rời thiết bị phản ứng}}$$

Thiết lập phương trình đối với thiết bị phản ứng quay vòng:

❖ Xét thiết bị phản ứng quay vòng ống dòng như sau:



Hình 9.1: Sơ đồ thiết bị phản ứng quay vòng.

– Đối với thiết bị:

$$\frac{V}{F_{A1}} = \int_{X_{A1}}^{X_{A2}=X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A} \quad (9.1)$$

trong đó :  $F_{A1}$  là tốc độ nạp liệu vào thiết bị phản ứng (bao gồm cả dòng nguyên liệu đầu và dòng chất chưa phản ứng quay vòng trở lại). Như vậy,  $F_{A1}$  và  $X_{A1}$  không được biết trực tiếp mà phải biểu diễn qua các đại lượng đã biết khác.

Ta có:

$F_{A1} = (\text{Dòng nguyên liệu đầu}) + (\text{Dòng chất A chưa phản ứng quay trở lại})$

$$F_{A1} = RF_{A0} + F_{A0} = (R+1)F_{A0} \quad (9.2)$$

– Độ chuyển hóa  $X_{A1}$  được xác định theo phương trình:

$$X_{A1} = \frac{1 - \frac{C_{A1}}{C_{A0}}}{1 + \varepsilon_A \frac{C_{A1}}{C_{A0}}} \quad (9.3)$$

Mặt khác,

$$C_{A1} = \frac{F_{A1}}{\dot{V}_1} = \frac{F_{A0} + F_{A3}}{\dot{V}_0 + R\dot{V}_f} = \frac{F_{A0} + RF_{A0}(1 - X_{Af})}{\dot{V}_0 + R\dot{V}_0(1 + \varepsilon_A X_{Af})} = C_{A0} \left( \frac{1 + R - RX_{Af}}{1 + R + R\varepsilon_A X_{Af}} \right) \quad (9.4)$$

Kết hợp phương trình (9.3) và (9.4) suy ra:

$$X_{A1} = \left( \frac{R}{R+1} \right) X_{Af} \quad (9.5)$$

Kết hợp phương trình (9.1) và phương trình (9.5) suy ra phương trình biểu diễn cho thiết bị phản ứng quay vòng:

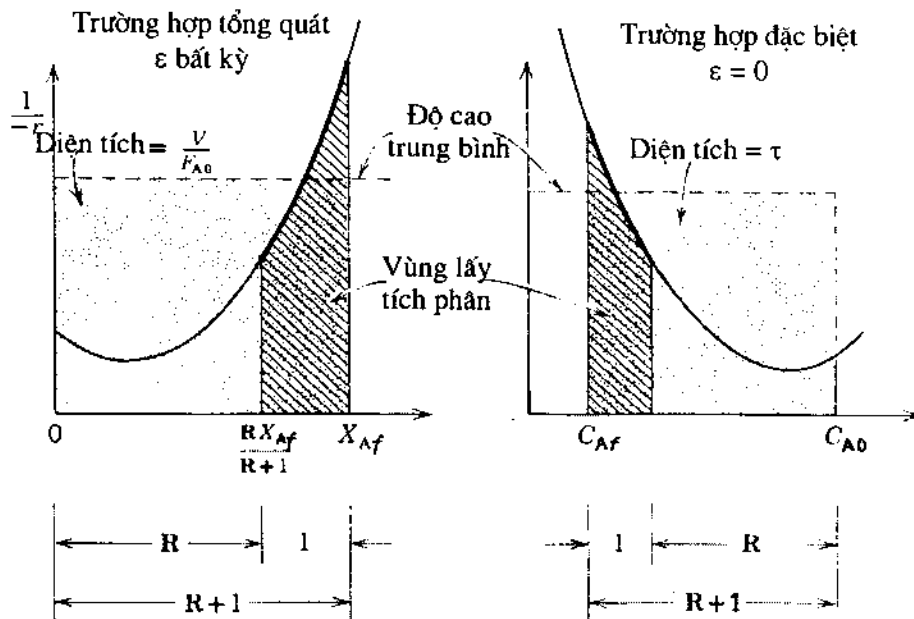
$$\frac{V}{F_{A0}} = (R+1) \int_{\left( \frac{R}{R+1} X_{Af} \right)}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A} \quad (9.6)$$

Trong trường hợp hệ số thay đổi  $\varepsilon \rightarrow 0$ , có thể viết phương trình (9.6) dưới dạng hàm theo nồng độ

$$\tau = \frac{C_{A0} V}{F_{A0}} = - (R+1) \int_{\frac{C_{A0} + RC_{Af}}{R+1}}^{C_{Af}} \frac{dC_A}{-r_A} \quad (9.7)$$



Các phương trình (9.6) và (9.7) được biểu diễn bằng đồ thị như sau:



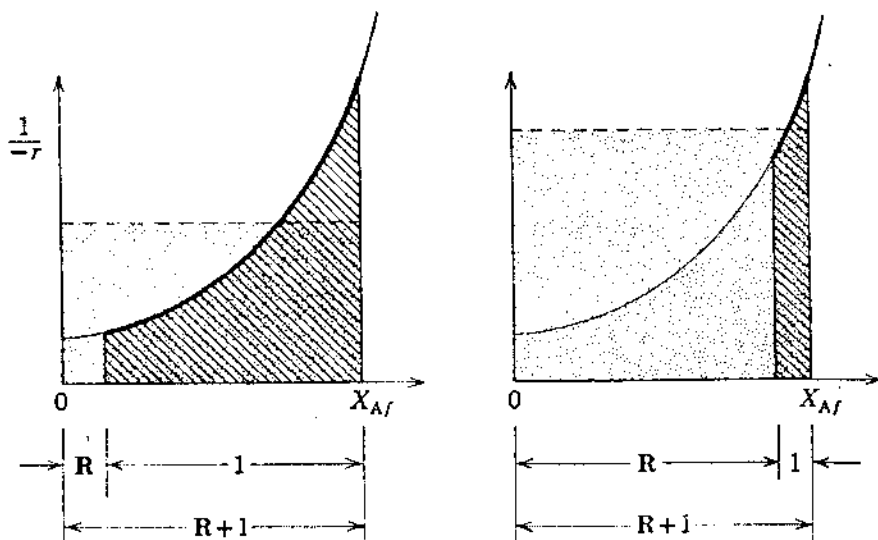
**Hình 9.2 :** Đồ thị biểu diễn phương trình hiệu năng của thiết bị phản ứng quay vòng.

Nhận xét: từ phương trình (9.6):

$$\frac{V}{F_{A0}} = (R+1) \int_{\left(\frac{R}{R+1} X_{Af}\right)}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A}$$

|                                                                   |                                                     |
|-------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|
| $\frac{V}{F_{A0}} = \int_0^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A}$ <p>PFR</p> | $\frac{V}{F_{A0}} = \frac{X_{Af}}{-r_A}$ <p>IMR</p> |
|-------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|

Biểu diễn bằng đồ thị như sau:



**Hình 9.3 :** Trường hợp hệ quay vòng tiến tới mô hình ống dòng ( $R \rightarrow 0$ ) và mô hình khuấy liên tục.

❖ Xét một số trường hợp ( $X_{A0} = 0$ ):

▪ Phản ứng bất thuận nghịch bậc 1:  $A \rightarrow \dots, -r_A = kC_A$

–  $\varepsilon = 0$

$$k\tau = (R+1) \ln \left[ \frac{C_{A0} + RC_{Af}}{(R+1)C_{Af}} \right] = (R+1) \ln \left[ \frac{1+R(1-X_{Af})}{(R+1)(1-X_{Af})} \right]$$

–  $\varepsilon \neq 0$

$$k\tau = (R+1)(1+\varepsilon_A) \ln \left[ \frac{1+R(1-X_{Af})}{(R+1)(1-X_{Af})} \right] - \varepsilon_A X_{Af}$$

▪ Phản ứng bất thuận nghịch bậc hai:  $2A \rightarrow \dots, -r_A = kC_A^2$

–  $\varepsilon = 0$

$$C_{A0}k\tau = (R+1) \frac{C_{A0}(C_{A0} - C_{Af})}{C_{Af}(C_{A0} + RC_{Af})}$$

$$- \varepsilon \neq 0$$

$$C_{A0}k\tau = 2\varepsilon_A(1+\varepsilon_A)(1+R)\ln\left[\frac{(1+R)(-X_{Af})}{1+R(1-X_{Af})}\right] + \varepsilon_A^2 X_{Af} + \frac{(1+\varepsilon_A^2)(R+1)X_{Af}}{(1-X_{Af})(1+R(1-X_{Af}))}$$

### Ví dụ 9.1

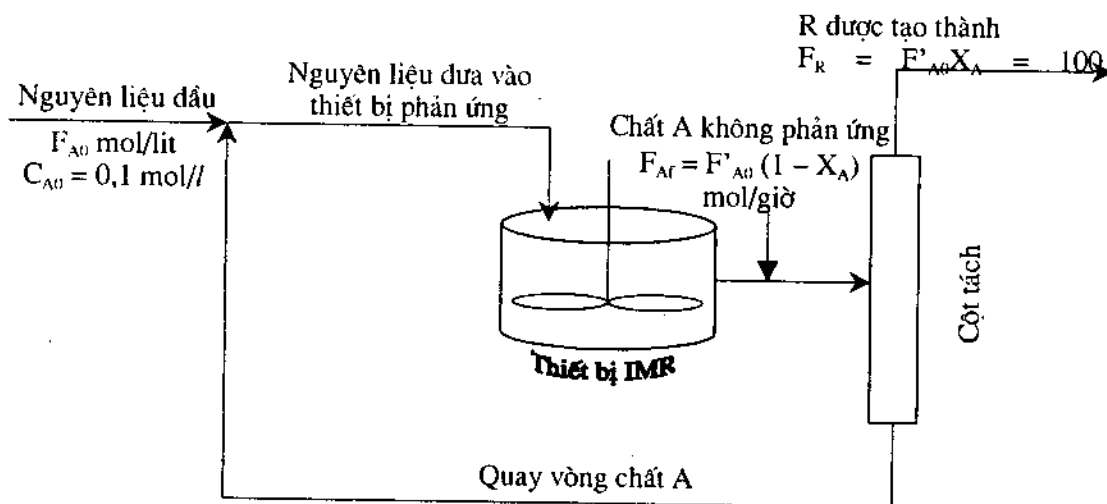
Phản ứng đồng thể ở pha lỏng  $A \rightarrow R$  có phương trình tốc độ:

$$r_R = k C_A, \quad k = 0,2 \text{ giờ}^{-1}$$

Được tiến hành trong thiết bị IMR. Nguyên liệu đầu là dung dịch bão hòa chất A có nồng độ  $C_{A0} = 0,1 \text{ mol/l}$ , giá thành của A ở nồng độ trên là  $\$_A = \$0,50/\text{molA}$ . Giá thành hao mòn thiết bị là  $\$_B = \$0,01/\text{giờ lit}$ . Quá trình phản ứng được thực hiện với tốc độ thu sản phẩm R là  $F_R = 100 \text{ mol R/giờ}$ .

Chất A không phản ứng hết được tách ra và đưa vào nồng độ bão hòa với tổng chi phí là  $\$_r = \$0,125/\text{mol}$ . Lượng chất A này được đưa quay vòng trở lại thành nguyên liệu.

Hãy tìm các điều kiện vận hành thiết bị tối ưu và chi phí sản xuất R



Hình 9.4: Sơ đồ thiết bị phản ứng IMR quay vòng.

### Lời giải

Tốc độ tạo thành R được xác định:

$$F_R = F'_{A0} X_A = F_{A0} = 100 \text{ mol/giờ} \quad (1)$$

Như vậy, tổng chi phí trong một giờ  $\$_t$  được tính:

$$\$ _t = \left\{ \begin{array}{l} \text{(Thể tích của thiết bị phản ứng)} \left( \frac{\text{Chi phí hao mòn thiết bị}}{(\text{Đơn vị thể tích}) (\text{Đơn vị thời gian})} \right) \\ + (\text{Tốc độ nạp liệu đầu}) (\text{Giá thành của một đơn vị sản phẩm}) \\ + (\text{Tốc độ tái sinh chất phản ứng}) (\text{Giá thành tái sinh một đơn vị chất phản ứng}) \end{array} \right.$$

$$\$ _t = V \$ _m + F'_{A0} \$ _A + F'_{A0} (1 - X_A) \$ _r \quad (2)$$

Với tốc độ nạp liệu vào thiết bị là  $F_{A0}$  thì:

$$V = \frac{F'_{A0} X_A}{k C_{A0} (1 - X_A)} \quad (3)$$

Tách  $F_{A0}$  theo phương trình (1). Như vậy, tổng chi phí sản xuất trong một giờ  $\$ _t$  được biểu diễn theo biến số  $X_A$

$$\begin{aligned} \$ _t &= \frac{F_{A0}}{k C_{A0} (1 - X_A)} \$ _m + F_{A0} \$ _A + \frac{F_{A0}}{X_A} (1 - X_A) \$ _r \\ \$ _t &= \frac{100}{(0,2)(0,1)(1 - X_A)} (0,01) + 100(0,5) + 100 \left( \frac{1 - X_A}{X_A} \right) (0,125) \\ \$ _t &= \frac{50}{1 - X_A} + 50 + 12,5 \left( \frac{1 - X_A}{X_A} \right) \end{aligned} \quad (4)$$

Tìm cực trị của  $\$ _t$  bằng cách lấy vi phân (4) rồi đặt bằng 0

$$\begin{aligned} \frac{d\$ _t}{dX_A} &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{50}{(1 - X_A)^2} - \frac{12,5}{X_A^2} &= 0 \\ \Rightarrow X_A &= 0,33 \end{aligned}$$

Như vậy, điều kiện vận hành thiết bị tối ưu là độ chuyển hóa  $X_A = 0,33$ .  
Suy ra:

- Thể tích của thiết bị:

$$V = \frac{100}{(0,2)(0,1)(0,67)} = 7500 \text{ lit}$$

- Tốc độ nạp nguyên liệu vào thiết bị:

$$F'_{A0} = \frac{F_{A0}}{X_A} = 300 \text{ mol A / giờ}$$

- Tốc độ quay vòng:

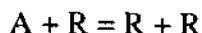
$$F'_{A0} - F_{A0} = 200 \text{ mol A / giờ}$$

- Giá thành của một đơn vị sản phẩm:

$$\frac{\$_t}{F_R} = \frac{50/0,67 + 50 + 12,5 \left( \frac{0,67}{0,33} \right)}{100} = \$1,50 / \text{mol R}$$

## 9.2. Phản ứng tự xúc tác

Phản ứng tự xúc tác là phản ứng mà có một trong các chất được tạo thành trong phản ứng đóng vai trò như chất xúc tác cho phản ứng đó. Phản ứng tự xúc tác dạng đơn giản nhất là:



Phương trình tốc độ phản ứng:

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = kC_A C_R \quad (9.8)$$

Vì tổng số mol của A và R là không thay đổi trong suốt quá trình phản ứng nên có thể viết:

$$C_0 = C_A + C_R = C_{A0} + C_{R0} = \text{hằng số}$$

Như vậy, phương trình tốc độ phản ứng trở thành:

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = kC_A (C_0 - C_A)$$

Biến đổi phương trình trên nhận được:

$$-\frac{dC_A}{C_A (C_0 - C_A)} = -\frac{1}{C_0} \left( \frac{dC_A}{C_A} + \frac{dC_A}{C_0 - C_A} \right) = kdt$$

Lấy tích phân phương trình trên suy ra:

$$\ln \frac{C_A (C_0 - C_{A0})}{C_{A0} (C_0 - C_A)} = \ln \frac{C_R / C_{R0}}{C_A / C_{A0}} C_0 kt = (C_{A0} - C_{A0})kt \quad (9.9)$$

Trong phản ứng tự xúc tác người ta thường cho một lượng nhỏ chất xúc tác vào hỗn hợp đầu để thúc đẩy quá trình phản ứng ngay từ đầu. Trong phản ứng tự xúc tác này khi đạt đến điểm cân bằng tốc độ phản ứng đột ngột giảm xuống không.

Đồ thị biểu diễn mối quan hệ giữa tốc độ phản ứng và nồng độ của các chất tham gia phản ứng:

Tốc độ phản ứng đạt cực đại khi  $C_A = C_R$ .

Chứng minh:

Từ phương trình tốc độ phản ứng (9.1):

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = kC_A C_R$$

Xét hàm:  $z = xy$

Với các số dương  $x$  và  $y$ , áp dụng bất đẳng thức Cauchy:

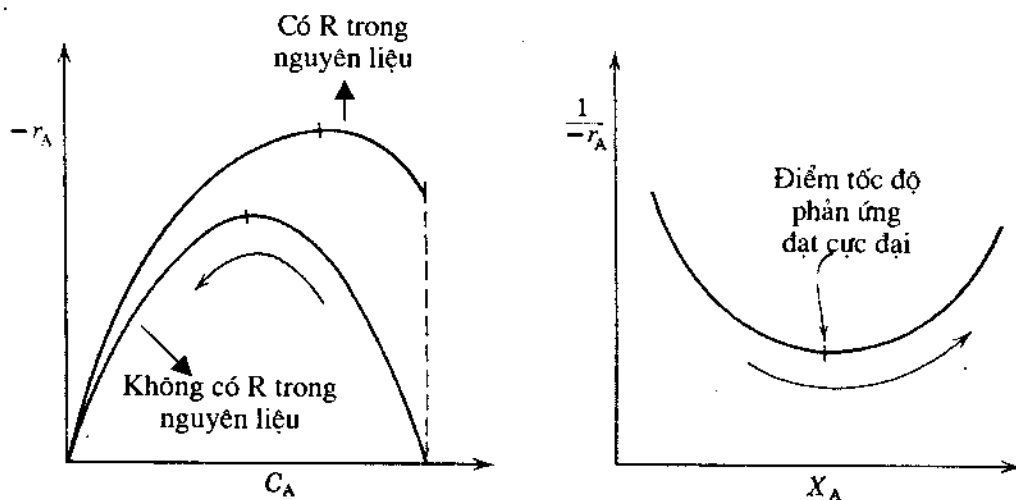
$$xy \leq \frac{x^2 + y^2}{2}$$

Dấu = xảy ra khi  $x = y$ .

Do đó, tốc độ phản ứng đạt cực đại khi  $C_A = C_R$

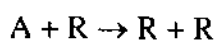
Như vậy, khi nhiệt độ, áp suất không thay đổi thì tốc độ phản ứng phụ thuộc vào nồng độ các chất tham gia phản ứng. Theo chứng minh trên nồng độ của phản ứng sẽ tăng dần đến một giá trị cực đại (khi  $C_A = C_R$ ) rồi giảm dần. Tuy

nhiên, đối với phản ứng tự xúc tác, tốc độ phản ứng tăng dần đến giá trị cực đại rồi giảm đột ngột khi chất tham gia phản ứng đã được tiêu thụ.



**Hình 9.5 :** Đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc của tốc độ phản ứng vào nồng độ chất trong phản ứng tự xúc tác.

Vậy đối với các phản ứng tự xúc tác, phương trình phản ứng có thể được viết như sau:



còn hệ thức biểu diễn tốc độ phản ứng:

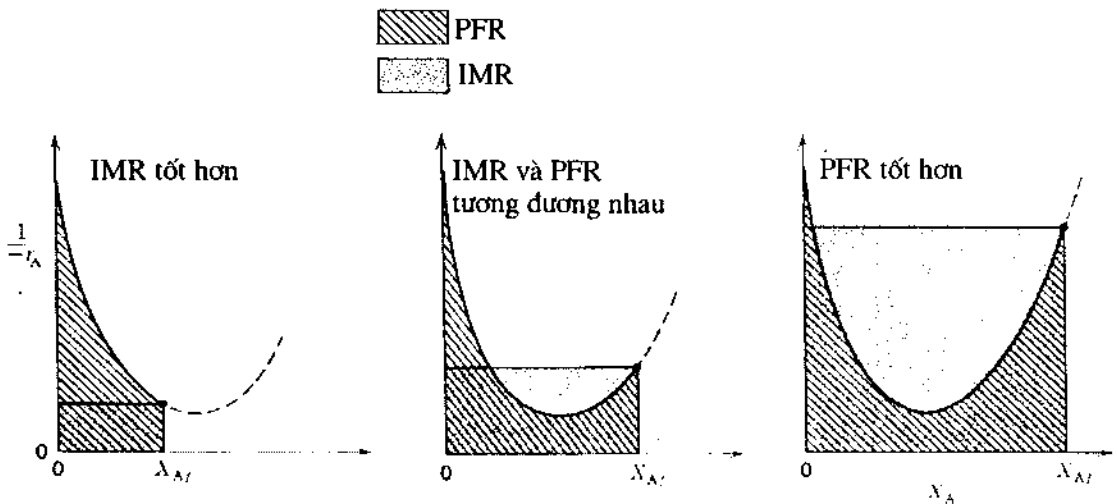
$$-r_A = kC_A^a C_R^r$$

### 9.2.1. Đối với thiết bị phản ứng không quay vòng

Đối với bất kỳ đường cong động học nào biểu diễn mối quan hệ giữa tốc độ phản ứng và nồng độ sẽ cho biết liệu thiết bị phản ứng nào là tốt hơn đối với một yêu cầu đặt ra. Cụ thể:

1. Ở độ chuyển hóa thấp thì thiết bị IMR đáp ứng tốt hơn PFR.
2. Ở độ chuyển hóa đủ lớn thì thiết bị PFR đáp ứng tốt hơn.

Mối quan hệ tốc độ phản ứng và nồng độ chất phản ứng của các thiết bị phản ứng được biểu diễn dưới dạng đồ thị như sau:



**Hình 9.6 :** So sánh hiệu quả giữa PFR và IMR ứng với độ chuyển hóa.

### 9.2.2. Đối với thiết bị phản ứng quay vòng

Khi chất phản ứng được xúc tác để nhanh chóng đạt đến độ chuyển hóa  $X_{Af}$  thì cũng phải có một tỉ số hồi lưu tối ưu tương ứng nào đó để sao cho thể tích của thiết bị và thời gian chết là nhỏ nhất.

Tỉ số hồi lưu tối ưu được tìm bằng cách lấy vi phân phương trình (9.6) theo  $R$  rồi đặt bằng 0 :

$$\frac{d\left(\frac{\tau}{C_{A0}}\right)}{dR} = 0 ; \quad \frac{\tau}{C_{A0}} = \int_{X_{Af} = \frac{RX_{Af}}{R+1}}^{X_{Af}} \frac{R+1}{(-r_A)} \quad (9.10)$$

Phép toán này đòi hỏi phải lấy vi phân hàm chứa phép toán tích phân. Theo lý thuyết :

$$F(R) = \int_{a(R)}^{b(R)} f(x, R) dx$$

thì

$$\frac{dF}{dR} = \int_{a(R)}^{b(R)} \frac{\partial f(x, R)}{\partial R} dx + f(b, R) \frac{db}{dR} - f(a, R) \frac{da}{dR}$$

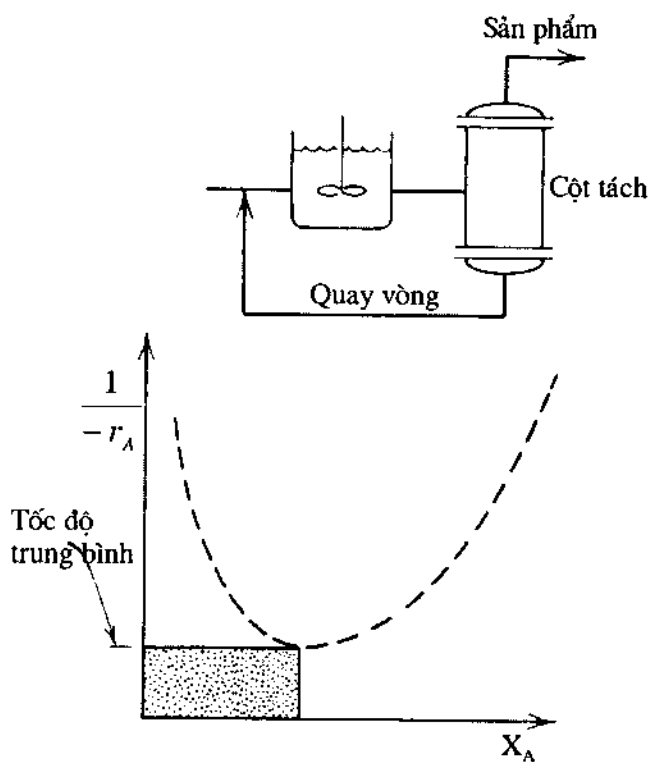


Áp dụng đối với (9.10) suy ra:

$$\frac{d\left(\frac{\tau}{C_{A0}}\right)}{dR} = 0 = \int_{X_{Ai}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{(-r_A)} + 0 - \frac{R+1}{(-r_A)} \bigg|_{X_{Ai}} \frac{dX_{Ai}}{dR}$$

trong đó:

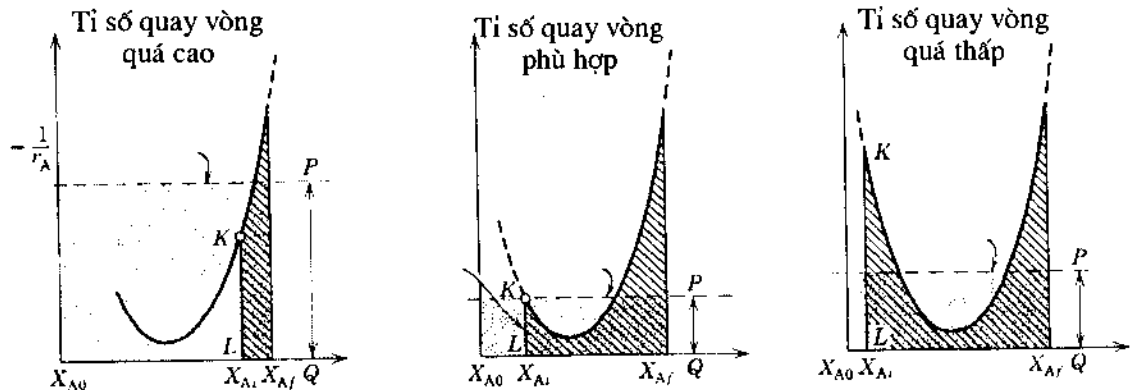
$$\frac{dX_{Ai}}{dR} = \frac{X_{Af}}{(R+1)^2}$$



**Hình 9.7 :** Sơ đồ tối ưu cho trường hợp có thể tách và quay vòng chất chưa phản ứng.

Kết hợp các phương trình trên và sắp xếp lại nhận được:

$$\left. \frac{1}{-r_A} \right|_{X_{A0}} = \frac{\int_{X_{A0}}^{X_{Af}} dX_A}{(X_{Ai} - X_{Af})} \quad (9.11)$$



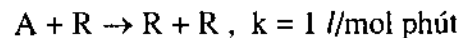
**Hình 9.8:** Đồ thị so sánh tỉ số quay vòng phù hợp với các tỉ số quay vòng quá thấp hoặc quá cao.

Khi so sánh thiết bị PFR và IMR nhận thấy:

1. Khi độ chuyển hóa thấp hơn điểm mà tốc độ phản ứng đạt cực đại thì thiết bị IMR đáp ứng tốt nhất.
2. Khi độ chuyển hóa cao hơn điểm mà tốc độ phản ứng đạt cực đại thì cả thiết bị IMR và PFR đều đáp ứng tốt.

### Ví dụ 9.2

Một phản ứng tự xúc tác có phương trình phản ứng cơ bản như sau:



được tiến hành trong một thiết bị phản ứng quay vòng sao cho đạt độ chuyển hóa là 99%.

Biết rằng:

Tốc độ nạp liệu  $F_{A0} = 1 \text{ mol/phút}$

Nguyên liệu chỉ chứa A ( $C_{A0} = 1 \text{ mol/l}$ )

- Tìm tỉ số quay vòng để kích thước của thiết bị là nhỏ nhất và xác định kích thước đó.
- So sánh kích thước tối ưu tìm được trong câu (a) với kích thước của một thiết bị phản ứng khi  $R = 4$ .
- So sánh kích thước tối ưu tìm được trong câu (a) với kích thước của một thiết bị IMR khi  $R \rightarrow \infty$ .
- So sánh kích thước tối ưu tìm được trong câu (a) với kích thước của một thiết bị phản ứng khi  $R = 0$ .

Lời giải

- Tìm tỉ số quay vòng tối ưu

Áp dụng phương trình (9.6)

$$\frac{V}{F_{A0}} = (R+1) \int_{\left(\frac{R}{R+1} X_{Af}\right)}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{kC_{A0}^2 X_A (1-X_A)}$$

Lấy tích phân và rút gọn phương trình trên nhận được:

$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{R+1}{kC_{A0}^2} \ln \frac{1+R(1-X_{Af})}{R(1-X_{Af})} \quad (*)$$

Cần tìm tỉ số quay vòng tối ưu sao cho  $V$  đạt giá trị nhỏ nhất, nói cách khác, chọn  $R$  sao cho phù hợp với phương trình (9.9). Suy ra:

$$\ln \frac{1+R(1-X_{Af})}{R(1-X_{Af})} = \frac{R+1}{R[1+R(1-X_{Af})]}$$

Cho  $X_{Af} = 0,99$  và rút gọn, ta nhận được:

$$\ln \frac{1+0,01R}{0,01R} = \frac{R+1}{R(1+0,01R)}$$

Giải phương trình trên bằng phương pháp thử nhận được  $R = 0,19$ . Như vậy, thể tích của thiết bị sẽ là:

$$V = 1,19 \ln \frac{1,0019}{0,0019} = 7,46 \text{ lit}$$

- b) Đối với thiết bị phản ứng quay vòng có hệ số quay vòng  $R = 4$ , áp dụng phương trình (\*) suy ra:

$$V = 5 \ln \frac{1,04}{0,04} = 16,3 \text{ lit}$$

- c) Đối với thiết bị IMR: kết hợp với phương trình (\*) nhận được:

$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{X_{Af}}{k C_{Af} C_{Rf}} = \frac{R+1}{k C_{A0}^2} \ln \frac{1+R(1-X_{Af})}{R(1-X_{Af})}$$

Thay các giá trị đã biết vào nhận được:

$$V = \frac{0,99}{0,09(0,01)} = 100 \text{ lit}$$

- d) Đối với thiết bị PFR:

$$\frac{V}{F_{A0}} = \int_0^{x_a} \frac{dX_A}{k C_{A0}^2 X_A (1-X_A)}$$

Thay các giá trị đã biết vào nhận được  $V \rightarrow \infty$ .

## BÀI TẬP CHƯƠNG 9

### Bài 9.1

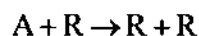
Người ta dự định tiến hành một phản ứng với nguyên liệu lỏng ( $n = 1$  và  $C_{A0} = 10 \text{ mol/l}$ ) trong thiết bị phản ứng quay vòng PFR (có  $R = 2$ ) sao cho độ chuyển hoá đạt 90%. Nếu tắt hệ thống quay vòng trở lại thì phải sau bao lâu mới đạt được độ chuyển hoá như trên?

### Bài 9.2

Một phản ứng cơ bản bậc hai ( $2A \rightarrow 2R$ ) xảy ra trong pha lỏng có độ chuyển hoá là  $2/3$  khi vận hành với tỉ số hồi lưu bằng 1. Nếu ngắt dòng hồi lưu thì độ chuyển hoá của phản ứng sẽ là bao nhiêu?

### Bài 9.3

Một phản ứng tự xúc tác:



$$(-r_A) = 1(\text{lit/mol} \times \text{phút})C_A C_R$$

Người ta dự định vận hành sao cho độ chuyển hoá của phản ứng là 99% từ nguyên liệu đầu chứa chất A tinh khiết có nồng độ đầu  $C_{A0} = 1 \text{ mol/lit}$ .

Hãy so sánh thể tích của thiết bị cần thiết của thiết bị để đáp ứng nhiệm vụ đề ra tại các điều kiện vận hành tại các tỉ số hồi lưu sau với điều kiện vận hành tại tỉ số quay vòng tối ưu là 0,19

- a) Tại tỉ số quay vòng  $R = 4$ .
- b) Tại tỉ số quay vòng  $R = \infty$ .
- c) Tại tỉ số quay vòng  $R = 0$ .

# CHƯƠNG 10

## BÀI TOÁN TỐI ƯU HÓA

Tất cả các quá trình hóa học tiến hành trong công nghiệp phải được thiết kế để đạt được hiệu quả kinh tế tốt nhất và tạo ra sản phẩm mong đợi từ các vật liệu ban đầu khác nhau qua các bước xử lý được tiến hành một cách tuần tự.

### \* Các bài toán kinh tế

#### 10.1. Thiết bị phản ứng lý tưởng gián đoạn

Một chu trình vận hành thiết bị BR gồm các bước làm sạch bình phản ứng, cho nguyên liệu vào và lấy sản phẩm ra (thời gian cho các bước này gọi là thời gian chết) rồi tiếp tục lặp lại các bước trước. Như vậy, tổng thời gian cho một mẻ phản ứng bao gồm thời gian lưu của phản ứng và thời gian chết:

$$t_{\text{tổng}} = t_{\text{phản ứng}} + t_{\text{chết}} \quad (10.1)$$

Do đó, lợi nhuận thu được trong mỗi giờ sẽ được tính như sau:

$$\text{Lợi nhuận/giờ} = \underbrace{\left( \frac{\text{Giá thành sản phẩm/mẻ}}{\text{Tổng thời gian/mẻ}} \right)}_{\substack{\text{(Phụ thuộc vào)} \\ V, C_{A0}, X_A}} - \underbrace{\left( \frac{\text{Giá thành nguyên liệu/mẻ}}{\text{Tổng thời gian/mẻ}} \right)}_{\substack{\text{(Phụ thuộc vào)} \\ V, C_{A0}}} - \underbrace{\left( \frac{\text{Chi phí vận hành và hao mòn thiết bị}}{\text{Tổng thời gian/mẻ}} \right)}_{\substack{\text{(Phụ thuộc vào)} \\ V, X_A}} \quad (10.2)$$

Các phương trình tính toán và cân bằng vật chất biểu diễn các mối quan hệ của các giá trị  $C_{A0}$ ;  $X_A$ ;  $-r_A$ ;  $C_R$  và  $V$  (10.3)

### Bài toán 10.1

Phản ứng bậc 1:  $A \rightarrow$  sản phẩm,  $\epsilon_A = 0$

Cân bằng vật chất:

$$F_R = F_{A0} X_A = \frac{C_{A0} X_A V}{t_{\text{tổng}}} \quad (10.3a)$$

Phương trình tính toán:

$$t_{\text{tổng}} = -\frac{1}{k} \ln(1 - X_A) + t_{\text{chết}}$$

Từ các phương trình trên có thể dẫn tới một số bài toán kinh tế như sau:

- > Tìm tốc độ thu lợi nhuận cực đại đối với một thiết bị phản ứng nào đó

$$\left. \begin{aligned} \frac{d}{dX_A} (\text{tốc độ thu lợi nhuận}) &= 0 \\ \text{hay } \frac{d}{dt} (\text{tốc độ thu lợi nhuận}) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (10.4)$$

- > Tìm tốc độ sản xuất tối đa đối với một thiết bị nào đó

$$\frac{dR}{dX_A} = 0 \text{ hay } \frac{dR}{dt} \quad (10.5)$$

## 10.2. Thiết bị lý tưởng liên tục

Thời gian lợi nhuận thu được trong mỗi giờ sẽ được tính như sau:

$$\text{Lợi nhuận/giờ} = \underbrace{\left( \frac{\text{Giá thành sản phẩm/giờ}}{\text{Tổng thời gian/mẻ}} \right)}_{\left( \text{Phụ thuộc vào } F_{A0}, C_{A0}, X_A \right)} - \underbrace{\left( \frac{\text{Giá thành nguyên liệu/giờ}}{\text{Tổng thời gian/mẻ}} \right)}_{\left( \text{Phụ thuộc vào } F_{A0}, C_{A0} \right)} - \underbrace{\left( \frac{\text{Chi phí vận hành và hao mòn thiết bị}}{\text{Tổng thời gian/mẻ}} \right)}_{\left( \text{Phụ thuộc vào } V, X_A \right)} \quad (10.6)$$

Các phương trình tính toán và cân bằng vật chất biểu diễn các mối quan hệ của các giá trị  $F_{A0}$ ;  $C_{A0}$ ;  $X_A$ ;  $-r_A$ ;  $F_R$  và  $V$  (10.7)

### Bài toán 10.2

Phản ứng bậc 1:  $A \rightarrow rR$

Cân bằng vật chất:

$$F_R = rF_{A0}X_A \quad (10.7a)$$

Phương trình tính toán:

$$\frac{VC_{A0}}{F_{A0}} = (1 + \varepsilon_A) \ln \frac{1}{(1 - X_A)} + \varepsilon_A X_A \quad (10.7b)$$

Từ các phương trình trên có thể dẫn tới một số bài toán kinh tế như sau:

- > Tìm  $V$ ,  $X_A$ ,  $F_R$  sao cho tốc độ thu lợi nhuận cực đại khi phản ứng được tiến hành với tốc độ nạp liệu cố định

$$\frac{d}{dX_A} (\text{tốc độ thu lợi nhuận}) = 0 \quad (10.8a)$$

- > Tìm  $V$ ,  $X_A$ ,  $F_R$  sao cho tốc độ thu lợi nhuận cực đại khi phản ứng được tiến hành với tốc độ nạp liệu cố định.

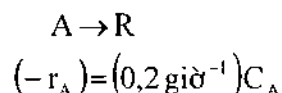
$$\frac{d}{dX_A} (\text{tốc độ thu lợi nhuận}) = 0 \quad (10.8b)$$

- > Tìm  $V$ ,  $X_A$ ,  $F_{A0}$  sao cho giá thành sản phẩm là nhỏ nhất khi phản ứng được tiến hành với năng suất  $F_R$  cố định.

$$\frac{d(\text{Giá thành sản phẩm})}{dX_A} = 0 \quad (10.9)$$

### Ví dụ 10.1

Bằng thiết bị IMR mỗi giờ người ta sản xuất được 100 mol R từ nguyên liệu đầu là dung dịch bão hòa chất A (nồng độ ban đầu  $C_{A0} = 0,1$  mol/lit). Phương trình tỉ lệ và phương trình tốc độ của phản ứng như sau:





Giá thành của nguyên liệu  $\$A$  (ở nồng độ  $C_{A0} = 0,1 \text{ mol/lit}$ ) là  $\$0,50/\text{mol}A$ . Chi phí hao mòn thiết bị  $\$m$  là  $\$0,01/\text{lit.giờ}$ .

Hãy tìm độ chuyển hoá, tốc độ nạp liệu và kích thước của thiết bị của phản ứng để giá thành của R là thấp nhất trong trường hợp:

- Khi chất A chưa phản ứng hết không được quay vòng trở lại.
- Khi chất A chưa phản ứng hết được tái sinh để quay vòng trở lại với chi phí quay vòng  $\$r$  là  $\$0,125/\text{mol}$  ở nồng độ ban đầu  $C_{A0} = 0,1 \text{ mol/lit}$ .

### Lời giải

- Đây là một bài toán tối ưu phải giải quyết cân bằng giữa độ chuyển hóa của phản ứng lớn (chi phí nguyên liệu thấp) kèm theo chi phí hao mòn thiết bị lớn và ngược lại. Như vậy, cần tìm điều kiện vận hành để tổng chi phí sản xuất R là thấp nhất.

Tổng chi phí trong 1 giờ sản xuất là:

$$\begin{aligned} \$_t &= (\text{Thể tích của thiết bị}) \left( \frac{\text{Chi phí hao mòn thiết bị}}{(\text{Thời gian})(\text{Thể tích thiết bị})} \right) + \\ &+ (\text{Vận tốc nạp liệu})(\text{Giá thành 1 mol chất phản ứng}) \\ \$_t &= V\$m + F_{A0}\$A \end{aligned}$$

Mặt khác, đối với thiết bị IMR thì:

$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{X_A}{(-r_A)}$$

Đối với phản ứng bậc 1 suy ra:

$$V = \frac{F_{A0}X_A}{kC_{A0}(1-X_A)}$$

Mặt khác tốc độ sản xuất R là:

$$F_R = F_{A0}X_A = 100 \text{ mol/giờ}$$

Loại bỏ số hạng  $F_{A0}$  trong biểu thức tính tổng chi phí sản xuất nhận được biểu thức chỉ phụ thuộc vào  $X_A$ :

$$\$_t = \frac{F_R}{kC_{A0}(1-X_A)}\$m + \frac{F_R}{X_A}\$A$$

$$S_i = \frac{100}{(0,2)(0,1)(1-X_A)}(0,01) + \frac{100}{X_A}(0,5)$$

$$S_i = \frac{50}{1-X_A} + \frac{50}{X_A}$$

Để  $S_i$  đạt cực trị thì:

$$\begin{aligned} \frac{d(S_i)}{dX_A} &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{50}{(1-X_A)^2} - \frac{50}{X_A^2} &= 0 \\ \Rightarrow X_A &= 0,5 \end{aligned}$$

Tốc độ nạp liệu sẽ là:

$$F_{A0} = \frac{F_R}{X_A} = \frac{100}{0,5} = 200 \text{ mol A / giờ}$$

Kích thước của thiết bị:

$$V = \frac{F_{A0} X_A}{k C_{A0} (1-X_A)} = \frac{100}{(0,2)(0,1)(0,5)} = 10.000 \text{ lit}$$

Như vậy, để chi cho một đơn vị R trong điều kiện vận hành này là:

$$S_R = \frac{S_i}{F_R} = \frac{V S_m + F_{A0} S_A}{F_R} = \frac{10.000(0,01) + 200(0,5)}{100} = \$2,00 / \text{mol R}$$

b) Để giải quyết được bài toán này xét cân bằng giữa chi phí thiết bị thấp và chi phí tái sinh chất phản ứng cao và ngược lại.

Tốc độ tạo thành R là:

$$F_R = F'_{A0} X_A = F_{A0} = 100 \text{ mol / giờ}$$

Do đó, tổng chi phí trong một giờ  $S_i$  được tính:

$$S_i = \left\{ \begin{array}{l} \text{(Thể tích của thiết bị phản ứng)} \left[ \frac{\text{Chi phí hao mòn thiết bị}}{(\text{Đơn vị thể tích}) (\text{Đơn vị thời gian})} \right] \\ + \text{(Tốc độ nạp liệu đầu)} (\text{Giá thành của một đơn vị sản phẩm}) \\ + \text{(Tốc độ tái sinh chất phản ứng)} (\text{Giá thành tái sinh một đơn vị chất phản ứng}) \end{array} \right.$$

Với tốc độ nạp liệu vào thiết bị là  $F_{A0}$  thì:

$$\$_i = V\$_m + F'_{A0} \$A + F'_{A0} (1 - X_A) \$r$$

$$V = \frac{F'_{A0} X_A}{kC_{A0}(1 - X_A)}$$

Tách  $F'_{A0}$  theo phương trình (10.1). Như vậy, tổng chi phí sản xuất trong một giờ  $\$_i$  được biểu diễn theo biến số  $X_A$

$$\$_i = \frac{F_{A0}}{kC_{A0}(1 - X_A)} \$m + F_{A0} \$A + \frac{F_{A0}}{X_A} (1 - X_A) \$r$$

$$\$_i = \frac{100}{(0,2)(0,1)(1 - X_A)} (0,01) + 100(0,5) + 100 \left( \frac{1 - X_A}{X_A} \right) (0,125)$$

$$\$_i = \frac{50}{1 - X_A} + 50 + 12,5 \left( \frac{1 - X_A}{X_A} \right)$$

Tìm cực trị của  $\$_i$  bằng cách lấy vi phân trên rồi đặt bằng 0

$$\begin{aligned} \frac{d\$_i}{dX_A} &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{50}{(1 - X_A)^2} - \frac{12,5}{X_A^2} &= 0 \\ \Rightarrow X_A &= 0,33 \end{aligned}$$

Vậy, điều kiện vận hành thiết bị tối ưu là độ chuyển hóa  $X_A = 0,33$ . Suy ra:

+ Thể tích của thiết bị:

$$V = \frac{100}{(0,2)(0,1)(0,67)} = 7500 \text{ lit}$$

+ Tốc độ nạp nguyên liệu vào thiết bị:

$$F'_{A0} = \frac{F_{A0}}{X_A} = 300 \text{ mol A / giờ}$$

+ Tốc độ quay vòng:

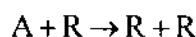
$$F'_{A0} - F_{A0} = 200 \text{ mol A / giờ}$$

+ Giá thành của một đơn vị sản phẩm:

$$\frac{S_i}{F_R} = \frac{50 \cdot 0,67 + 50 + 12,5 \left( \frac{0,67}{0,33} \right)}{100} = \$1,50 / \text{molR}$$

Ví dụ 10.2

Một phản ứng tự xúc tác:



$$(-r_A) = 1 (\text{lit/mol} \times \text{phút}) C_A C_R$$

Người ta dự định vận hành sao cho độ chuyển hóa của phản ứng là 99% từ nguyên liệu đầu chứa chất A tinh khiết có nồng độ đầu  $C_{A0} = 1 \text{ mol/lit}$ . Hãy tìm tỉ số quay vòng tối ưu để thể tích cần thiết của thiết bị để đáp ứng yêu cầu đặt ra là nhỏ nhất?

Lời giải

Để giải quyết được yêu cầu đặt ra cần giải bài toán tìm tỉ số quay vòng tối ưu đối với thiết bị phản ứng.

Từ phương trình (9.6) đối với hệ thống phản ứng quay vòng đã được xét trong chương 9

$$\frac{\tau}{C_{A0}} = \frac{V}{F_{A0}} = (R+1) \int_{\frac{R}{R+1} X_{Af}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{(-r_A)}$$

Để tìm tỉ số quay vòng tối ưu cho điều kiện vận hành trên lấy vi phân phương trình trên:

$$\frac{d\left(\frac{\tau}{C_{A0}}\right)}{dR} = 0 \quad (10.10)$$

Mặt khác, theo lý thuyết số:

Nếu:

$$F(R) = \int_{a(R)}^{b(R)} f(x, R) dx \quad (10.11a)$$

thì:

$$\frac{dF}{dR} = \int_{a(R)}^{b(R)} \frac{\partial f(x, R)}{\partial R} dx + f(b, R) \frac{db}{dR} - f(a, R) \frac{da}{dR} \quad (10.11b)$$

Suy ra:

$$\frac{d\left(\frac{\tau}{C_{A0}}\right)}{dR} = 0 = \int_{X_{Ai}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{(-r_A)} + 0 - \left.\frac{R+1}{(-r_A)}\right|_{X_{Ai}} \frac{dX_{Ai}}{dR}$$

Trong đó:

$$\frac{dX_{Af}}{dR} = \frac{X_{Af}}{(R+1)^2}$$

Kết hợp các phương trình trên nhận được:

$$\left.\frac{1}{(-r_A)}\right|_{X_{Ai}} = \frac{\int_{X_{Ai}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{(-r_A)}}{(X_{Af} - X_{Ai})} \quad (10.12)$$

Đối với bài toán đặt ra:

$$\frac{V}{F_{A0}} = (R+1) \int_{X_{Ai} = \frac{R}{R+1}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{kC_{A0}^2 X_A (1-X_A)}$$

Lấy tích phân và đơn giản phương trình trên nhận được:

$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{R+1}{kC_{A0}^2} \ln \frac{1+R(1-X_{Af})}{R(1-X_{Af})}$$

Áp dụng phương trình (10.12) cho bài toán trên nhận được:

$$\ln \frac{1+R(1-X_{Af})}{R(1-X_{Af})} = \frac{R+1}{R[1+R(1-X_{Af})]}$$

Thay  $X_{Af} = 0,99$  và đơn giản hóa biểu thức trên nhận được:

$$\ln \frac{1+0,01R}{0,01R} = \frac{1+R}{R[1+0,01R]}$$

Giải phương trình trên bằng phương pháp dò nghiệm nhận được  $R = 0,19$ .

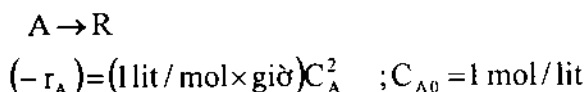
Vậy thể tích cần thiết cho thiết bị khi được vận hành ở tỉ số quay vòng trên là:

$$V = 1,19 \ln \frac{1,0019}{0,0019} = 7,64 \text{ lit}$$

## BÀI TẬP CHƯƠNG 10

### Bài 10.1

Một phản ứng bậc hai trong pha lỏng xảy ra ở nhiệt độ phòng có phương trình phản ứng và phương trình tốc độ như sau:



Người ta dự định tiến hành phản ứng trong một thiết bị phản ứng khuấy lý tưởng gián đoạn. Hãy tìm:

- Tỉ số quay vòng R tối ưu để tốc độ sản xuất là lớn nhất?
- Tốc độ thu lợi nhuận lớn nhất nếu chất A không phản ứng bị loại bỏ?
- Tốc độ thu lợi nhuận lớn nhất nếu chất A không phản ứng được tái sinh và sử dụng lại với chi phí tái sinh = 0?
- Tốc độ thu lợi nhuận lớn nhất nếu chất A không phản ứng được tái sinh và sử dụng lại với chi phí tái sinh = 50% so với giá thành của nguyên liệu?

Biết rằng:

Thời gian ngắt quãng ở mỗi mẻ là 1 giờ. Giá thành nguyên liệu cho mỗi mẻ là \$100, giá thành sản phẩm cho mỗi mẻ là \$200.

### Bài 10.2

Người ta tiến hành sản xuất chất R với tốc độ 40 kmol/giờ bằng phản ứng thủy phân chất A trong thiết bị IMR làm việc với nguyên liệu ban đầu có nồng độ chất A là 1 kmol/m<sup>3</sup>. Vì lượng nước trong phản ứng là rất lớn nên có thể coi phản ứng này tuân theo quy luật động học của phản ứng bậc 1 mặc dù đây là phản ứng lưỡng phân tử. Hỗn hợp phản ứng sau khi đi ra khỏi thiết bị phản ứng được dẫn vào một cột tách.

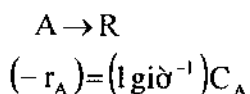
Biết rằng sau khi ra khỏi thiết bị phản ứng còn lại 2% chất A không phản ứng. Chi phí hao mòn thiết bị và công vận hành là \$20/giờ, giá thành chất A là \$1,00/kmol, giá thành của sản phẩm là \$1,32/kmol.

- Hãy tính lợi nhuận thu được trong một giờ trong điều kiện vận hành hiện tại.
- Nếu điều kiện vận hành hiện tại là chưa tối ưu, hãy tìm điều kiện vận hành tối ưu để lợi nhuận thu được là lớn nhất và tính lợi nhuận trong điều kiện vận hành đó.

### **Bài 10.3**

Người ta tiến hành một phản ứng pha lỏng ở nhiệt độ phòng trong một thiết bị phản ứng lý tưởng gián đoạn để sản xuất R.

Phương trình phản ứng và phương trình tốc độ như sau:

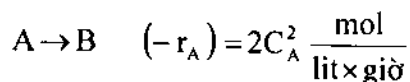


- Hãy tìm điều kiện vận hành để tốc độ sản xuất R là nhanh nhất và tính lợi nhuận thu được khi vận hành thiết bị trong điều kiện đó.
- Hãy tìm điều kiện vận hành để lợi nhuận mỗi mẻ thu được là tối đa và tính lợi nhuận thu được theo ngày.
- Hãy tìm điều kiện vận hành để tốc độ thu lợi nhuận là tối đa và tính lợi nhuận thu được theo ngày.

Biết rằng nồng độ của chất A trong nguyên liệu đầu  $C_{A0} = 1 \text{ mol/lit}$ . Sau mỗi mẻ cần 1 giờ để lấy sản phẩm ra, làm sạch bình phản ứng và cho nguyên liệu vào. Giá thành của nguyên liệu là \$100/mẻ, giá thành của sản phẩm là \$200/mẻ. Chi phí vận hành và hao mòn thiết bị là \$5/ngày.

### **Bài 10.4**

Người ta dự định sản xuất R với năng suất 1000 molR/giờ từ nguyên liệu ban đầu là dung dịch chất A (nồng độ 1 mol/lit). Phương trình tỉ lượng và phương trình tốc độ của phản ứng như sau:

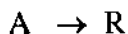


Giá thành của chất phản ứng là \$0,40/mol và chi phí cho quá trình sản xuất là \$0,10/(lit giờ). Chất A không phản ứng bị loại bỏ. Hãy tìm điều kiện vận hành tối ưu để chi phí sản xuất R là thấp nhất.



**Bài 10.5:**

Một chất A có trong nước thải (chảy với lưu lượng 1000 lit/giờ) với nồng độ 1 mol/lit có thể chuyển hóa thành chất R theo phương trình phản ứng:



Người ta tiến hành phản ứng trên trong một thiết bị IMR với chi phí vận hành và hao mòn thiết bị là \$0,20/(lit giờ). Nếu R được bán với giá là \$1,00/molR thì thiết bị phải được vận hành như thế nào để lợi nhuận thu được là lớn nhất.

## **ĐÁP SỐ VÀ HƯỚNG DẪN PHẦN II**

## CHƯƠNG 5: ĐỘNG HỌC CỦA PHẢN ỨNG ĐỒNG THỂ

### Bài 5.1

Không đủ dữ liệu để trả lời câu hỏi này vì bậc phản ứng không thể xác định được từ phương trình tỉ lượng.

### Bài 5.2

Mối quan hệ giữa tốc độ hình thành của sản phẩm phản ứng và tốc độ mất đi của chất tham gia phản ứng như sau:

$$-\frac{1}{2} \frac{d_{\text{NO}_2}}{dt} = \frac{d_{\text{N}_2\text{O}_5}}{dt}$$

$$-2 \frac{d_{\text{O}_2}}{dt} = \frac{d_{\text{N}_2\text{O}_5}}{dt}$$

### Bài 5.3

Phương trình biểu diễn tốc độ phản ứng không thay đổi.

### Bài 5.4

Theo biểu thức tính tốc độ phản ứng trên:

$$k = 0,005 \frac{\text{cm}^3}{\text{mol phút}}$$

$$k = 0,005 \frac{10^{-3} \text{ l}}{\text{mol} \frac{1}{60} \text{ giờ}}$$

$$k = 3 \times 10^{-4} \frac{\text{ l}}{\text{mol giờ}}$$

### Bài 5.5

- a) Đơn vị biểu diễn hằng số tốc độ k là  $\text{atm}^{-1} \text{ giờ}^{-1}$

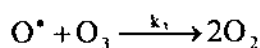
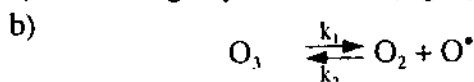
$$k = 3,66 \frac{\text{atm} / \text{giờ}}{\text{atm}^2}$$

$$k = 3,66 \text{ atm}^{-1} \text{ giờ}^{-1}$$

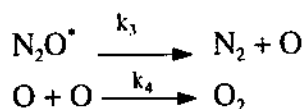
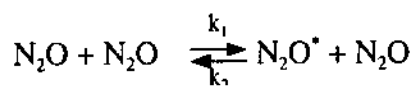
b)  $k = 202,11 (\text{l mol}^{-1} \text{ h}^{-1})$

**Bài 5.6**

a) Phản ứng này tuân theo động học của phản ứng bậc 1.

**Bài 5.7**

Cơ chế 1 không phù hợp, cơ chế 2 phù hợp.

**Bài 5.8****Bài 5.9**

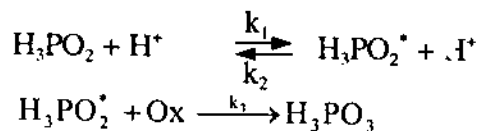
Hằng số tốc độ của phản ứng này ở 650°C lớn gấp 3000 lần hằng số tốc độ ở 500°C.

**Bài 5.10**

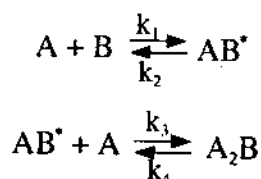
- a) Bậc phản ứng là 3/2.
- b) Bậc phản ứng là bậc 1.
- c) Phản ứng có bậc là 1.

**Bài 5.11**

Cơ chế phản ứng

**Bài 5.12:**

Cơ chế phản ứng

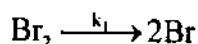
**Bài 5.13**

Hướng dẫn

$$\begin{aligned} -r_{\text{N}_2\text{O}_5} &= k_1[\text{N}_2\text{O}_5] - k_2[\text{NO}_2][\text{NO}_3^*] \\ r_{\text{NO}_3^*} &= k_1[\text{N}_2\text{O}_5] - k_2[\text{NO}_2][\text{NO}_3^*] - k_3[\text{NO}_3^*] - k_4[\text{NO}^*][\text{NO}_3^*] \\ r_{\text{NO}^*} &= k_3[\text{NO}_3^*] - k_4[\text{NO}_3^*][\text{NO}^*] \end{aligned}$$

**Bài 5.14:**

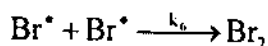
- Phản ứng khơi mào:



- Giai đoạn phát triển mạch:



- Giai đoạn ngắt mạch:



**Bài 5.15**

Thành lập phương trình tốc độ

$$-r_A = \frac{k_1 k_3 [A][E_0]}{k_2 + k_3 + k_1 [A]}$$

Chúng minh dựa trên phương trình tốc độ này.

**Bài 5.16**

Xem xét vận tốc phản ứng thuận và vận tốc phản ứng nghịch khi đạt trạng thái cân bằng như sau

$$\begin{aligned} k_1 [Cl_2]^{3/2} [CO] &= k_2 [Cl_2]^{1/2} [COCl_2] \\ \Rightarrow \frac{k_1}{k_2} &= \frac{[COCl_2]}{[Cl_2][CO]} \end{aligned}$$

$\Leftrightarrow$  phù hợp về mặt nhiệt động học.

## CHƯƠNG 6: CÁC THIẾT BỊ PHẢN ỨNG LÝ TƯỜNG ĐƠN GIẢN

### **Bài 6.1**

$$t = 12.75 \text{ phút}$$

### **Bài 6.2**

- a)  $V = 25 \text{ (l)}$
- b)  $V = 50 \text{ (l)}$
- c)  $V = 29,167 \text{ (l)}$

### **Bài 6.3**

- a)  $X = 0,75$
- b)  $X = 0,667$

### **Bài 6.4**

$$V = 986 \text{ (l)}$$

### **Bài 6.5**

$$\tau = 134,1 \text{ (s)}$$

### **Bài 6.6**

- a)  $\tau = 300 \text{ (s)}$
- b)  $\tau = 1200 \text{ (s)}$

### **Bài 6.7**

$$V = 329 \text{ (l)}$$

**Bài 6.8**

Phương trình tốc độ của phản ứng trên là:

$$\underbrace{(-r_A)} = \left[ \underbrace{8,25 \times 10^6 e^{-\frac{13400}{RT}}}_{\text{}} \right] C_A^{1/2}$$

$$\left( \frac{\text{mol}}{\text{lit} \times \text{s}} \right) \left( \frac{\text{mol}}{\text{lit}} \right)^{1/2} \text{s}^{-1} \left( \frac{\text{mol}}{\text{lit}} \right)$$



## CHƯƠNG 7: THIẾT BỊ PHẢN ỨNG CÓ THỂ TÍCH THAY ĐỔI

### Bài 7.1

Tốc độ phản ứng:

$$-r_A = \frac{dX_A}{d(V/F_{A0})} = 540 \frac{\text{mmol}}{\text{l.s}} = 0,54 \frac{\text{mol}}{\text{l.s}}$$

### Bài 7.2

Phương trình tốc độ của phản ứng là:

$$-r_A = 0,004 (\text{mmol/lit phút}) C_A^2$$

### Bài 7.3

$$\tau = 33,2(\text{s})$$

### Bài 7.4

Phương trình tốc độ của phản ứng dime hóa nói trên là:

$$-r_A = 1,0 \left( \frac{1}{\text{giờ} \times \text{mmol}} \right) \times C_A^2 \left( \frac{\text{mmol}}{\text{l} \times \text{giờ}} \right)$$

### Bài 7.5

Thời gian lưu thực:  $t = 1$  phút

### Bài 7.6

a)  $X = 0,67$ .

b)  $V = 106 \text{ (lit)}$

**Bài 7.7**

$$t_{\text{thực}} = 0.725 \text{ (s)}$$

**Bài 7.8**

Phương trình tốc độ của phản ứng sẽ là:

$$(-r_A) = 100 (\text{giờ}^{-1}) C_A$$

**Bài 7.9**

$$V = 2397 \text{ cm}^3$$

**Bài 7.10**

Phương trình tốc độ phản ứng được viết như sau:

$$(-r_A) = 0,1 (\text{s}^{-1}) C_A$$

**Bài 7.11**

$$V = 2125 \text{ (l)}$$

**Bài 7.12**

$$V = 185 \text{ m}^3$$

**Bài 7.13**

Thể tích tăng 2,2 lần

**Bài 7.14**

$$X = 0,84$$

$$V = 38 \text{ (l)}$$

## CHƯƠNG 8: HỆ THỐNG CÁC THIẾT BỊ PHẢN ỨNG

### Bài 8.1

Chứng minh

$$k(\tau_1 + \tau_2) = \frac{C_o}{C_1} + \frac{C_1}{C_2} - 2$$

điều kiện  $\tau$  nhỏ nhất

$$\frac{d(\tau_1 + \tau_2)}{dC_1} = 0$$

### Bài 8.2

Đối với phản ứng bậc một thì thứ tự của bình phản ứng trong hệ không làm thay đổi giá trị độ chuyển hóa của phản ứng.

### Bài 8.3

$$(-r_A) = \left( \frac{1}{48} \frac{\text{lit}}{\text{mol} \times \text{s}} \right) C_A^2$$

### Bài 8.4

$$V_2 = 1,5V_1$$

### Bài 8.5

Trong trường hợp phản ứng là bậc 1 thì cách sắp xếp trong hệ thống trên không làm thay đổi độ chuyển hóa của phản ứng.

**Bài 8.6**

$$C_{A2} = 0,1 \text{ mol/l}$$

**Bài 8.7**

$$\tau_{\text{PFR}} = 38 \text{ (s)}$$

**Bài 8.8**

$$\tau_{\text{PFR}} = 297 \text{ phút}$$

**Bài 8.9**

$$V_1 = \dot{V} \tau_1 = 27 \text{ (lit)}$$

$$V_2 = \dot{V} \tau_2 = 19 \text{ (lit)}$$

**Bài 8.10**

$$V_{\text{IMR}} = \dot{V} \tau_{\text{IMR}} = 100(1,2) = 120 \text{ (lit)}$$

$$V_{\text{PFR}} = \dot{V} \tau_{\text{PFR}} = 100(5,8) = 580 \text{ (lit)}$$

## CHƯƠNG 9: THIẾT BỊ PHẢN ỨNG QUAY VÒNG VÀ PHẢN ỨNG TỰ XÚC TÁC

### Bài 9.1

$$\frac{\tau_{\text{không quay vòng}}}{\tau_{\text{quay vòng}}} = \frac{3 \ln 4}{\ln 10} = 1,8$$

### Bài 9.2:

$$X_A = \frac{3}{4} = 0,75$$

### Bài 9.3

$$V_{\text{tối ưu}} = 7,64 \text{ l}$$

a)

$$V = 5 \ln \frac{1,04}{0,04} = 16,3 \text{ lit}$$

b)

$$V_{\text{IMR}} = \frac{0,99}{0,99(0,01)} = 100 \text{ lit}$$

c)

$$V_{\text{PFR}} \rightarrow \infty$$

**CHƯƠNG 10: BÀI TOÁN TỐI ƯU HÓA****Bài 10.1**

- a) 0\$
- b) Lợi nhuận cho 1 ngày = \$300 / ngày
- c) Lợi nhuận cho 1 ngày = \$600 / ngày
- d) Lợi nhuận cho 1 ngày = \$400 / ngày

**Bài 10.2**

- a) Đối với điều kiện vận hành hiện tại,  $X_A = 0,98$   
Lợi nhuận thu trong 1 giờ = - \$8 / giờ
- b) Lợi nhuận thu được trong điều kiện vận hành này là \$25/giờ.

**Bài 10.3**

- a) Lợi nhuận thu trong 1 ngày = \$288 / ngày
- b) Lợi nhuận trong 1 ngày = \$367 / ngày
- c) Lợi nhuận trong ngày = \$464,5 / ngày

**Bài 10.4**

$$F_{A0} = \frac{1000}{\frac{2}{3}} = 1500 \text{ mol / giờ}$$

$$V = \frac{1000}{1 - \frac{2}{3}} = 3000 \text{ lit}$$

$$\text{Giá thành sản xuất } R (\$_R) = \frac{\$_t}{1000} = \frac{1}{1000} \left( \frac{400}{\frac{2}{3}} + \frac{100}{1 - \frac{2}{3}} \right) = \$0,9 / \text{molR}$$

**Bài 10.5**

Tốc độ nạp liệu, thể tích thiết bị tối ưu và tốc độ thu lợi nhuận tại điều kiện vận hành để

$$F_R = 1000(0,7) = 700 \frac{\text{mol}}{\text{giờ}}$$

$$V = \frac{1000X_A}{(-r_A)} = \frac{1000(0,7)}{1,0} = 700 \text{ lit}$$

$$\$_t = \$460/\text{giờ}$$

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. *J. M. Coulson, J. F. Richardson, J. R. Backhurst and J. H. Harker*  
**Chemical engineering**  
*Vol 2: Unit operation, 3<sup>rd</sup> edition, 1978*  
 Pergamon Press (Oxford, New York, Toronto, Sydney, Paris, Frankfurt).
2. *J. M. Coulson, J. F. Richardson, J. R. Backhurst and J. H. Harker*  
**Chemical engineering**  
*Vol 5: Solutions to the Problem in Chemical Engineering Vol 2, 1<sup>st</sup> edition, 1979*  
 Pergamon Press (Oxford, New York, Toronto, Sydney, Paris, Frankfurt).
3. *Peter Kripylo, Gerhard Landschulz und Wilhelm Pritzkow*  
**Aufgaben Zur technischen Chemie**  
*1. Auflage, 1976*  
 VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie (Leipzig).
4. *H. H. Emons, M. Fedtke, H. Hoppe, G. Landschulz, R. Pöschl, W. Pritzkow, M. Rätzsch und G. Zimmermann*  
**Lehrbuch der technischen chemie**  
*1. Auflage, 1974*  
 VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie (Leipzig).
5. *Octave Levenspiel*  
**Chemical reaction engineering**  
*2<sup>nd</sup> edition, 1976*  
 John Wiley and Sons (New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore).



# **BÀI TẬP HÓA KỸ THUẬT**

**Tác giả : PHẠM HÙNG VIỆT**

|                                    |                      |
|------------------------------------|----------------------|
| <i>Chịu trách nhiệm xuất bản :</i> | PGS. TS. TÔ ĐĂNG HẢI |
| <i>Biên tập :</i>                  | ThS. NGUYỄN HUY TIẾN |
| <i>Sửa bài :</i>                   | NGỌC LINH            |
| <i>Trình bày bìa :</i>             | LAN HƯƠNG            |

**NHÀ XUẤT BẢN KHOA HỌC VÀ KỸ THUẬT**  
**70 TRẦN HƯNG ĐẠO – HÀ NỘI**

---

In 500 cuốn, khổ 19 x 27cm, tại Công ty In Thương Mại (Bộ Thương Mại)

Quyết định xuất bản số: 75 / 2007/CXB/89.1- 02/KHKT / 22/6/2007.

In xong và nộp lưu chiểu Quý III năm 2007.

2 0 7 1 6 3



Giá: 54.000đ