

# Praca dyplomowa inżynierska

## Badanie równowagi ekstrakcyjnej



**Autor: Magdalena Król**

Nr albumu: 277581

Promotor: dr inż. Piotr Machniewski

Rok akademicki: 2019/2020

### Wprowadzenie

W przemyśle chemicznym proces ekstrakcji jest stosowany powszechnie. Jednym z zastosowań jest rozdzielanie węglowodorów alifatycznych lub alkoholi, które są otrzymywane w reakcjach syntezy przy pomocy katalizatorów. Ekstrakcja jest procesem rozdzielania substancji ciekłych lub stałych. Decydujące znaczenie w procesie ma transport masy odbywający się na drodze dyfuzji i konwekcji. Przenoszenie cząsteczek pomiędzy fazami trwa do momentu osiągnięcia stanu równowagi. Niezwykle ważna jest więc umiejętność obliczania stanów równowagi fazowej jak i współczynników charakteryzujących szybkość transportu masy.

### Cel i zakres pracy

Celem niniejszej pracy jest opracowanie metodologii badania równowagi fazowej ciecz – ciecz w układzie trójskładnikowym (propanol – pentanol – woda) przy pomocy dydaktycznego zestawu pomiarowego, wykorzystywanego w ramach Laboratorium Termodynamiki Procesowej oraz zbadanie możliwości modelowania równowagi fazowej dla badanego układu.

Zakres pracy obejmuje:

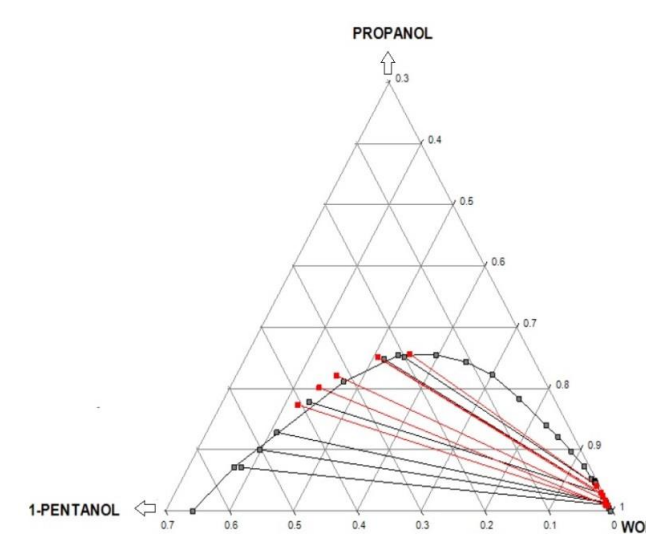
- doświadczalne wyznaczenie krzywej granicznej rozpuszczalności dla układu propanol – pentanol – woda metodą miareczkowania,
- wykonanie krzywej kalibracyjnej niezbędnej do interpretacji pomiarów refraktometrycznych,
- zaimplementowanie modelu matematycznego pozwalającego na obliczenie równowagowych składów faz,
- weryfikacja wyników obliczeń przy pomocy wykonanych pomiarów doświadczalnych oraz danych literaturowych.

### Część teoretyczna

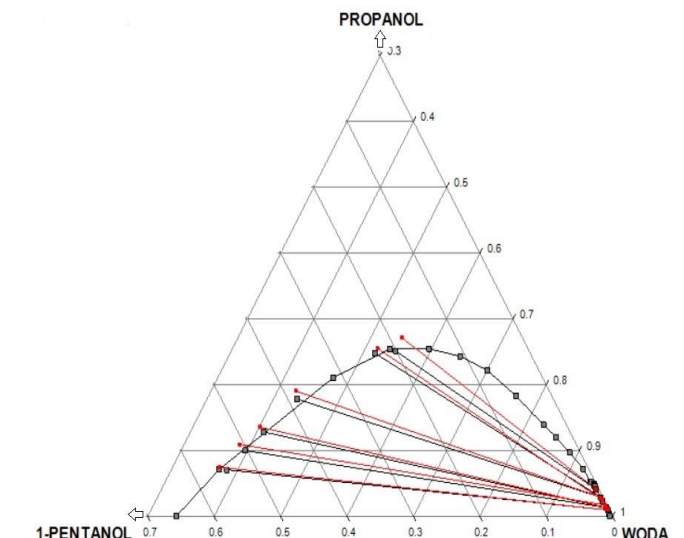
Teoretyczna część pracy zawiera definicję procesu ekstrakcji, podstawy teoretyczne zjawiska rozpuszczalności, jego opis z punktu widzenia termodynamiki oraz sposoby wyznaczania stanu równowagi. Omówiono także wpływy temperatury i ciśnienia na krzywą równowagi. Przedstawiono definicję aktywności składników w roztworach rzeczywistych oraz sposoby ich wyznaczania za pomocą modeli półempirycznych, NRTL i UNIQUAC.

### Wyniki

W części doświadczalnej przedstawiono opis procedury doświadczalnej oraz analizę wyników pomiarów równowagowych składów faz przeprowadzonych metodą chromatografii gazowej i metodą refraktometryczną. Sprawdzono także przydatność wybranych metod obliczeniowych do modelowania równowagi ciecz-ciecz w badanym układzie. Następnie, porównano otrzymane wyniki z danymi dostępnymi w literaturze naukowej.



**Rys.1.** Porównanie cięciw równowagi wyznaczonych za pomocą pomiarów refraktometrycznych oraz obliczonych za pomocą modelu NRTL (czerwony)



**Rys. 2.** Porównanie cięciw równowagi wyznaczonych za pomocą pomiarów refraktometrycznych oraz obliczonych za pomocą modelu UNIQUAC (czerwony)

Wyniki pomiarów chromatograficznych okazały się mniej dokładne od wyników pomiarów refraktometrycznych i wykazywały większy rozrzut oraz odchylenie od wyznaczonej wcześniej krzywej granicznej. Wykorzystując dane doświadczalne, dla składów fazy dolnej, wyznaczonych metodą refraktometryczną, obliczono równowagowy skład fazy górnej (drugi koniec cięciwy równowagi) za pomocą równań NRTL (rys. 1). W ten sam sposób obliczono cięciwy równowagowe przy pomocy modelu matematycznego UNIQUAC (rys. 2.). Cięciwy wyznaczone przy pomocy równań UNIQUAC lub NRTL zaznaczono kolorem czerwonym.

### Wnioski

Po przeprowadzeniu analizy wyników obliczeń oraz ich porównania z wynikami pomiarów można wywnioskować, iż model matematyczny UNIQUAC sprawdził się lepiej niż NRTL. Przebieg cięciw wyznaczonych przy pomocy równania UNIQUAC jest bardziej zbliżony do danych doświadczalnych. Użycie modeli półempirycznych oraz porównanie wyników pomiarowych z danymi literaturowymi wykazało dość dobrą zgodność. Niewielkie rozbieżności były związane z tym, że krzywa graniczna wyznaczona na podstawie danych literaturowych, po stronie fazy organicznej miała nieco szerszy zakres luki mieszalności niż ta, wyznaczona doświadczalnie, w niniejszej pracy. Na podstawie wyników doświadczalnych sprawdzono także stosowalność metody graficznej, dzięki której można przewidzieć przebieg innych cięciw równowagi w układzie. Przetestowano również metodę graficzną oraz trzy metody empiryczne: Bachmana, Bancrofta oraz Tobiasa – Othmera. Analiza otrzymanych wyników pokazała, że najlepsze dopasowanie do punktów doświadczalnych badanego układu wykazuje metoda Bachmana.