



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM

GÉPÉSZMÉRNÖKI KAR DOKTORI TANÁCSA

DOKTORI TÉZISFÜZET

Dénes Ferenc

okleveles vegyészmérnök

**ÚJ KÉTOSZLOPOS RENDSZEREK SZAKASZOS
HETEROAZEOTROP DESZTILLÁCIÓRA**

(New Double-Column Systems for Batch Heteroazeotropic Distillation)

című témakörből,

mellyel a PhD fokozat elnyeréséért pályázik

Témavezetők: Láng Péter MTA doktora

BME Épületgépészeti és Gépészeti Eljárástechnika Tanszék

Prof. Xavier Joulia

INP Toulouse – ENSIACET – Laboratoire de Génie Chimique

Budapest

2012

Bevezetés és a kutatás előzményei

Az Épületgépészeti és Gépészeti Eljárástechnika Tanszéken az elválasztó műveletek területén folytatott kutatásokba 2005-ben kapcsolódtam be. A szakaszos desztillációs módszerekkel ekkor Dr. Láng Péter (későbbi témavezetőm), dr. Modla Gábor és Kótai Barnabás foglalkoztak. Doktori tanulmányaim megkezdése (2007) előtt a témában diplomamunkát, és két (kari I., illetve II. díjas) TDK dolgozatot készítettem.

Negyedéves hallgatóként poszter előadással részt vettem a Distillation & Absorption 2006 világkonferencián Londonban. 2008-ban részt vettem a Berliini Műszaki Egyetemen rendezett, a témához kapcsolódó két hetes nyári egyetemen. 2009-ben 3 hónapot töltöttem a franciaországi INP – ENSIACET egyetem Laboratoire de Génie Chimique tanszékén a kinti partner finanszírozásában, ahol a témámhoz kapcsolódó első laboratóriumi kísérleteket végeztem. 2010-től doktori munkámat kétirányítású képzés keretein belül folytattam, és háromszor öt hónapot töltöttem a fenti tanszéken a francia kormány ösztöndíjasaként.

Az azeotropot képező és a kis relatív illékonyágú elegyek hatékony és gazdaságos szétválasztása gyakori probléma a vegy- és élelmiszeriparban. Az ilyen elegyek nagy tisztaságban történő szétválasztása komponenseikre hagyományos desztillációs módszerekkel nem lehetséges. Megoldást jelentenek a speciális desztillációs módszerek, amelyek közül doktori munkámban elsősorban a szakaszos heteroazeotrop desztillációval foglalkoztam. Amikor kis anyagmennyiséget kell szétválasztani és a betáplálás jellemzői gyakran változnak, a szakaszos üzemmód eredményesebben alkalmazható, mint a folyamatos.

Ha egy elegy komponensei heteroazeotropot képeznek, vagy egy szétválasztó ágenssel (hordozó) heteroazeotropot képeznek, az azeotrop ponton dekantálással átléphetünk. A gyógyszer- és finomkémiai iparban gyakoriak a szakaszos folyamatok, beleértve a szakaszos heteroazeotrop desztillációt (SZHD) is. Legjobb tudomásunk szerint a SZHD-t az iparban kizárólag nyílt működési módban (folyamatos fejterméklevétellel), dekanterrel felszerelt szakaszos rektifikálóban (SZR) alkalmazzák.

A szigorodó környezetvédelmi előírások, és az emelkedő energiaárak mellett egyre nagyobb jelentőséggel bír a desztillációs szétválasztások optimális tervezése és üzemeltetése. A környezetvédelem szempontjából igen fontos az eddig gyakran égetéssel megsemmisített hulladék oldószer elegyek (melyek komponensei gyakran képeznek azeotropokat) hatékony regenerálásának megoldása. Az értékes komponensek visszanyerése gazdasági szempontból is igen előnyös lehet. A szakaszos desztilláció igen energiaigényes művelet, így a geometriai és

műveleti paraméterek helyes megválasztásával, optimalizálásával jelentős energia-megtakarítás érhető el.

Kutatásaim célja a heteroazeotrop desztilláció szakaszos üzemmódban történő megvalósítása lehetőségeinek és azok hatékonyságának vizsgálata volt egyszerűsített és részletes modellező számításokkal, valamint laboratóriumi és félüzemi kísérletekkel. Vizsgálatokat végeztem két új konfigurációra, melyek működtetését, energiaigényét és termékkinyerését összehasonlítottam a hagyományos szakaszos rektifikálóval (SZR).

A vizsgált új berendezések – a SZR-tól eltérően – két, párhuzamosan üzemelő oszlopot tartalmaznak, és zárt rendszerben, azaz folyamatos terméklevétel nélkül működnek. Az alaptípus (kétoszlopos rendszer, KOR) oszlopainak közös totális kondenzátora és dekantere van (1. ábra). Ennek általánosított változatában (általánosított kétoszlopos rendszer, ÁKOR) mindegyik oszlopnak saját totális kondenzátora van, és a dekanter csak az egyik oszlophoz tartozik (2. ábra).

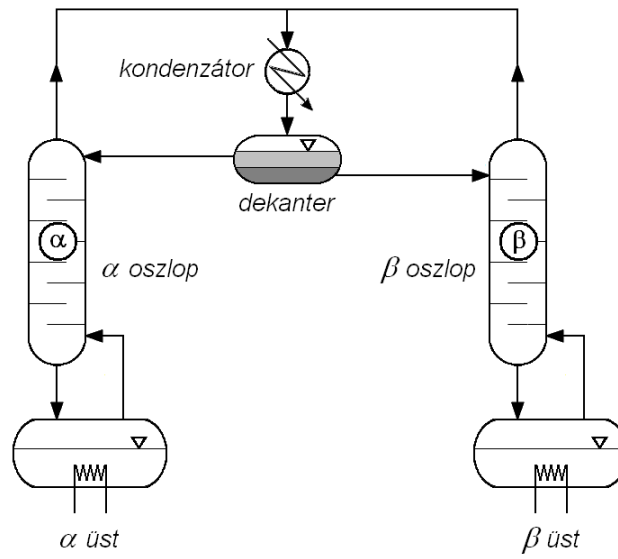
A KOR működése (A-B binér heteroazeotrop elegy esetén)

A sarzs egyik részét az egyik, másik részét a másik üstbe töltjük. Heterogén sarzs esetén az egyes fázisok külön üstbe kerülnek: az A komponensben dús az A-t gyártó (α) oszlop üstjébe, a B komponensben dús pedig a B-t gyártó (β) oszlopéba.

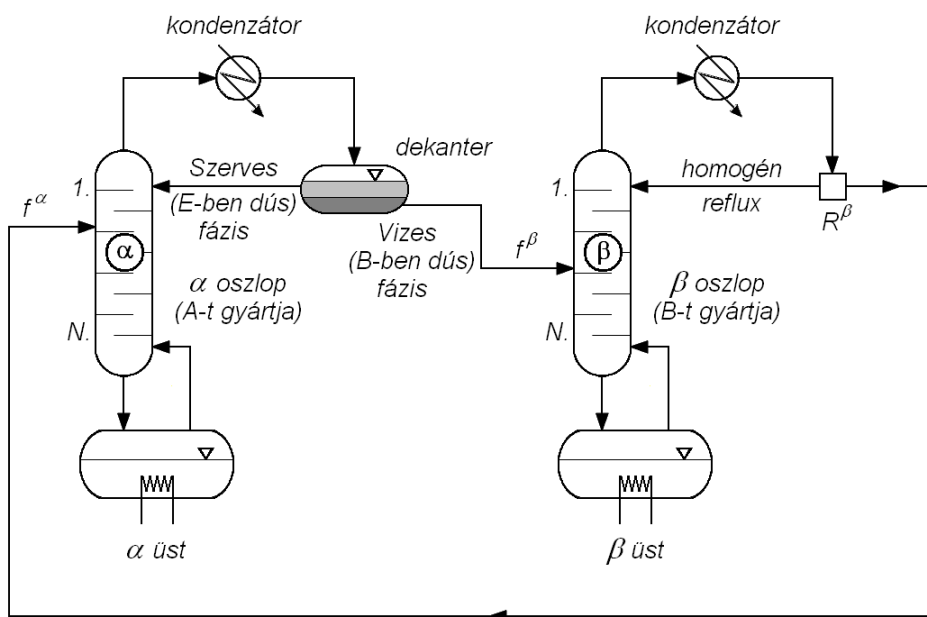
A két oszlop (közel azeotrop összetételű) feiggőzei egy közös kondenzátorba vannak vezetve. Ezután a kondenzátum egy dekanterbe kerül, ahonnan az A-ban dús fázist az α oszlopba, a B-ben dúsat pedig a β oszlopba vezetjük vissza. A folyamat végén az α üstben az A, a β üstben a B terméket kapjuk. A binér heteroazeotrop elegyre a továbbiakban binér elegyként hivatkozom.

Az ÁKOR működése (A-B binér homoazeotrop elegy esetén E hordozóval)

A sarzsot megosztjuk a két üst között, majd az α üstbe hordozót is töltünk. Az α oszlop feiggőze közel terner azeotróp, a β oszlopé közel A-B binér azeotróp összetételű. Az α oszlop heterogén kondenzátumát a dekanterbe vezetjük. A könnyű (E-ben dús, szerves) fázist az α oszlopba vezetjük vissza, a nehéz (B-ben dús, vizes) fázist pedig a β oszlopba. A β oszlop homogén kondenzátuma egyik részét refluxként visszavezetjük, a másik részét pedig az α oszlopba tápláljuk. Az E-ben dús fázist az α oszlopba, az (elhanyagolható mennyiségű E-t tartalmazó) B-ben dúsat pedig a β oszlopba vezetjük vissza. A folyamat végén az α üstben az A, a β üstben a B terméket kapjuk, E pedig döntően a dekanterben lesz jelen.



1. ábra: A kétoszlopos rendszer alapváltozatának sémája



2. ábra: Az általánosított kétoszlopos rendszer sémája

Vizsgálati módszerek

Az egyes konfigurációk működését a következő módszerekkel vizsgáltuk meg:

- megvalósíthatósági vizsgálat (egyszerűsített modell alapján),
- részletes számítógépi modellezés,
- laboratóriumi és félüzemi kísérletek.

A *megvalósíthatósági vizsgálat* célja, hogy becslést adjon a folyamatok időtartamára és a termékek mennyiségére. A következő feltételezéseken alapuló egyszerűsített modellt alkalmaztuk:

- maximális szétválasztás,
- elhanyagolható folyadék- és gőzholdup a tányérokon,
- állandó folyadékholdup a dekanterben (az egyes komponensek össz mennyisége állandó),
- elhanyagolható gőzholdup a dekanterben,
- állandó moláris párolgás,
- időben állandó fűtési sebesség,
- a dekantert elhagyó folyadékáramok egyfázisúak,
- a SZR esetén:
 - elhanyagolható áttöltési idő a műveleti lépések között,
 - a binér homoazeotrop elegy + hordozó (a továbbiakban terner elegy) esetén a hordozóveszteség elhanyagolható.

Részletes modellező számításokkal megvizsgáltuk a legfontosabb működési paraméterek hatását, valamint meghatároztuk az egyes konfigurációk minimális üzemidejét, és az ezekhez tartozó termékmennyiségeket.

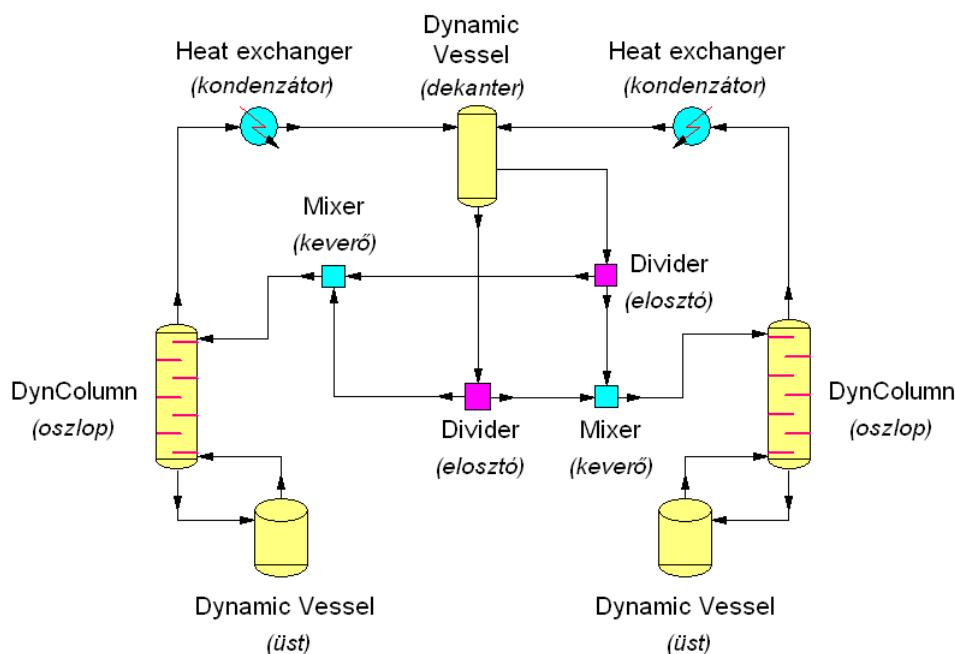
A szimulációk során a következő egyszerűsítéseket alkalmaztuk:

- elméleti tányérok,
- állandó térfogatú folyadékholdup a tányérokon és a dekanterben,
- elhanyagolható gőzholdup,
- elhanyagolható áttöltési idő a SZR műveleti lépései között.

A megoldandó modellegyenletek jól ismertek:

- nemlineáris közönséges differenciálegyenletek (anyag-mérlegek, hőmérlegek),
- algebrai egyenletek (gőz-folyadék ill. folyadék-folyadék egyensúlyi egyenletek, összegzési egyenletek, a holdup és a fizikai tulajdonságok modelljei).

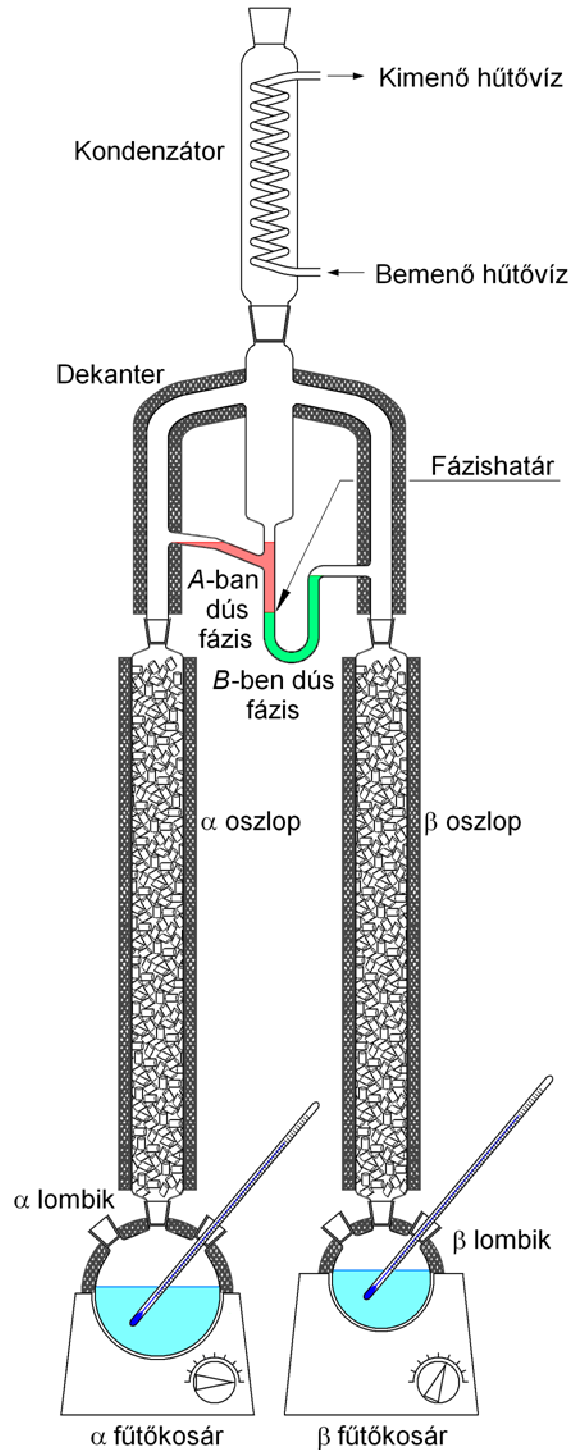
A fázisegyensúlyok leírására a binér elegynél az NRTL, a ternernél pedig a UNIQUAC modelleket használtuk. A fenti egyenletek megoldására a ChemCAD 5.6-6.4 programok dinamikus szimulátorát (CC-DCOLUMN) használtuk. A KOR ChemCAD-modellje a 3. ábrán látható.



3. ábra: A KOR ChemCAD-modellje

A számítások *kísérleti igazolását* a toulouse-i ENSIACET egyetemen végeztük két különböző berendezéssel: először egy kisméretű laboratóriumival, majd egy félüzemi méretűvel.

A *laboratóriumi berendezés* (4. ábra) elemei üvegből készültek. Az 1 méter töltetmagasságú oszlopok belső átmérője 30 mm. Töltet: 7 mm-es üveg Raschig-gyűrűk. Az oszlopok kettősfalúak, habosított polimerrel hőszigeteltek. A kondenzátor egy közös, vízhűtésű spirálhűtő. A dekanter hőszigetelt, holdup-ja 55 ml. Az üstként használt háromnyakú gömblombikok térfogata 1000 és 2000 cm³. Villamos fűtőköpenyeik teljesítménye 300, valamint 450 W. Az üstökben lévő folyadék hőmérsékletét folyamatosan mértük. A termékek összetételét törésmutatójuk alapján határoztuk meg.

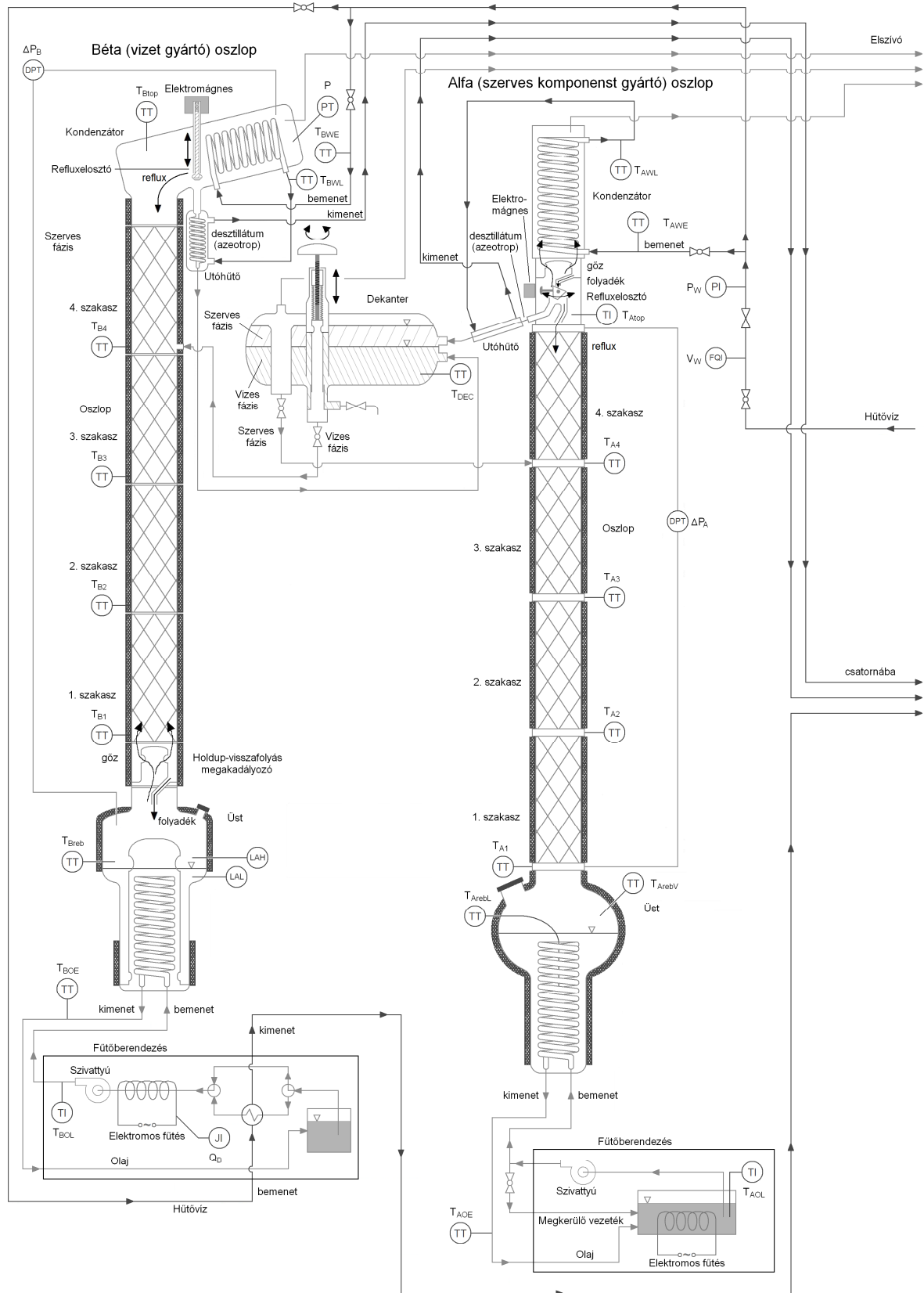


4. ábra. A laboratóriumi desztilláló berendezés sémája

A laboratóriumi berendezés elsősorban a folyamat megvalósíthatóságának kísérleti igazolására szolgált.

A rugalmasabb üzemeltetés és a működésről szerzendő több információ érdekében megépítettünk egy félüzemi berendezést (5. ábra), melynek elemei szintén üvegből készültek.

Mindkét oszlop 4 darab, egyenként 1 méter töltetmagasságú, 80 mm névleges belső átmérőjű oszlopszakaszból áll, melyek fémből készült rendezett töltete Sulzer CY, valamint Kühni Rombopak típusú. Mindkét oszlop refluxelosztóval van felszerelve. Az oszlopok különálló, vízűtésű háromszoros és négyszeres menetű spirálhűtővel, és egy-egy utóhűtővel rendelkeznek. A dekanter holdup-ja $3,6 \text{ dm}^3$. Az üstök térfogata 10 és 11 dm^3 , fűtésük dupla, valamint négyszeres üvegspirálon keresztül történik, melyekben villamos fűtéssel melegített olaj kering. A fűtőberendezések teljesítménye 6, valamint 4 kW. Az üstök és az oszlopok hőszigetelve vannak. A hőmérsékletet folyamatosan mértük az üstökben az egyes oszlopszakaszokon, az oszlop tetején, és a dekanterben. A mért mennyiségeket adatgyűjtő regisztrálja. A termékek összetételét törésmutatójuk alapján, illetve gázkromatográffal határozzuk meg.



5. ábra. A féliüzemi desztilláló berendezés sémája

Új tudományos eredmények

Új kétoszlopos rendszereket fejlesztettünk ki binér heteroazeotrop és homoazeotrop elegyek szakaszos heteroazeotrop desztillációjára. Az új konfigurációkra és a szakaszos rektifikálóra megvalósíthatósági vizsgálatokat, részletes számítógépi szimulációs számításokat, valamint laboratóriumi és félüzemi kísérleteket végeztem, és ezek eredményei alapján összehasonlítottam a konfigurációk hatékonyságát. (A tesztelegyek 1-butanol – víz, valamint izopropanol – víz + benzol/ciklohexán/n-hexán hordozók voltak.)

Ezenkívül összefüggést vezettem le a kevesebb mellékterméket eredményező terméksorrend meghatározására kétfázisú binér heteroazeotrop elegy szakaszos rektifikálóban való feldolgozása esetén. Összehasonlítottam a homoazeotrop elegy szétválasztása során használható különböző hordozó komponensek hatékonyságát is.

1. tézis

Kapcsolódó publikációk: [1], [6], [7], [10], [11]

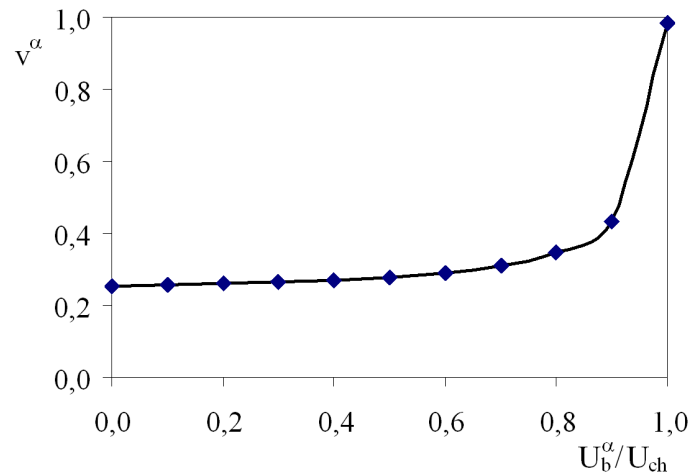
Javaslatot tettünk egy szakaszos heteroazeotrop desztillációra alkalmas új kétoszlopos rendszerre (KOR), amely egy binér heteroazeotrop vagy egy binér homoazeotrop hordozó hozzáadásával történő szétválasztására alkalmas, melyben az *A* és *B* komponensek gyártása egyidejűleg történik.

Kidolgoztam egy komponens- és teljes anyagmérlegeket tartalmazó, egyszerűsített modellt, amely alapján megvalósíthatósági vizsgálatokat végeztem. Analitikusan megoldottam az anyagmérlegeket az egyik oszlopra és a dekanterre. A KOR esetén feltételeztem, hogy mindkét termék egyszerre éri el az előírt tisztaságot, azaz a folyamat időtartama minimális.

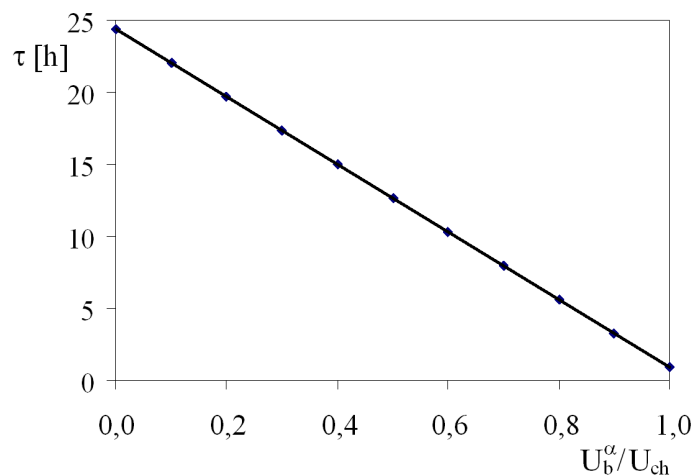
Több különböző összetételű binér elegyre is meghatároztam a SZR üzemidejét, valamint a KOR-re azt, hogy a sarzs két üst közötti elosztása (az α oszlop üstjébe betöltött anyag mennyiségének és a sarzs mennyiségének hányadosa, U_b^α/U_{ch}) hogyan befolyásolja az összes gőzárám – minimális üzemidőt eredményező – elosztását (az α oszlop gőzárámának és a két oszlop együttes gőzárámának hányadosa, $v^\alpha = V^\alpha/V$, 6. ábra) és az üzemidőt (τ , 7. ábra). A terner elegy esetére is meghatároztam a SZR üzemidejét, és azt, hogy a két oszlop közötti gőzárámelosztás hogyan befolyásolja a minimális üzemidőt eredményező sarzselosztást és az üzemidőt.

A vizsgálatok eredményei szerint a konfiguráció megvalósíthatónak bizonyult.

Laboratóriumi kétoszlopos rendszerben sikeresen megvalósítottam azeotrop összetételű ($x_{ch,A} = 0,256$), kétfázisú 1-butanol – víz elegy szétválasztását, így a KOR megvalósíthatóságát kísérletileg is igazoltam.



6. ábra: Az α oszlop optimális relatív gőzárama a sarzselosztás függvényében
(sarzs: 90 mol% 1-butanol – 10 mol% víz)



7. ábra: Üzemidő a sarzselosztás függvényében
(sarzs: 90 mol% 1-butanol – 10 mol% víz)

2. tézis

Kapcsolódó publikációk: [1], [7], [9], [13], [14]

Az új kétoszlopos rendszert összehasonlítottam a dekanterrel felszerelt hagyományos szakaszos rektifikálóval (SZR). Az összehasonlítást először a megvalósíthatósági vizsgálatok, majd a részletes modellezés, végül pedig a laboratóriumi kísérletek eredményei alapján végeztem el.

A megvalósíthatósági vizsgálatok során a két konfiguráció összes gőzárama azonos volt. Megállapítottam, hogy a kétoszlopos rendszer versenyképes a hagyományos szakaszos rektifikálóval. Közel azonos üzemidő mellett a KOR-rel nagyobb a termékek kinyerése, és nincs melléktermék (*1. táblázat*).

		SZR			KOR	
		1. lépés	2. lépés	Összesen	α oszlop	β oszlop
Sarzselosztás	kmol	-	-	-	51,8	48,2
Gőzáramelosztás	-	-	-	-	0,9530	0,0470
Üzemidő	h	2,006	0,100	2,106	2,141	
A termék	kmol	29,298	0,000	29,298	29,798	0,000
B termék	kmol	0,000	69,823	69,823	0,000	70,202
Melléktermék	kmol	-	0,879	0,879	0,000	

1. táblázat: A KOR és a SZR összehasonlítása a megvalósíthatósági vizsgálatok alapján, heterogén binér sarzs esetén (30 mol% 1-butanol)

A részletes modellezés során az egyes konfigurációk összes fűtőteljesítménye és osztányszáma azonos volt. A KOR-re meghatároztam – a minimális üzemidőt adó – optimális tányérszám-, sarzs- és fűtélosztást. A terner elegyre mindkét konfigurációra meghatároztam az optimális hordozómennyiséget is. Megállapítottam, hogy a megvalósíthatósági vizsgálatok eredményeihez hasonlóan, a kétoszlopos rendszer versenyképes a hagyományos szakaszos rektifikálóval. Közel azonos üzemidő mellett a KOR-rel a szerves (értékesebb) komponens kinyerése minden esetben nagyobb volt (2. táblázat).

		SZR			KOR	
		1. lépés	2. lépés	Összesen	α oszlop	β oszlop
Tányérszám	-	10	10	-	5	5
Sarzsosztás	kmol	-	-	-	51,8	48,2
Fűtélosztás	kW	200	200	-	191,2	8,8
Üzemidő	h	3,15	0,18	3,33	3,50	
A termék	kmol	24,948	0,000	24,948	26,948	0,000
B termék	kmol	0,000	65,851	65,851	0,000	65,449
Melléktermék	kmol	6,492	2,709	9,201	7,603	

2. táblázat: A KOR és a SZR összehasonlítása a részletes modellezés alapján, heterogén binér sarzs esetén (30 mol% 1-butanol)

Az azeotrop összetételű 1-butanol – víz elegy szétválasztását – a KOR mellett – a laboratóriumi méretű berendezést hagyományos szakaszos rektifikálóként működtetve is elvégeztem. Összehasonlítva a SZR-val, a KOR esetén ugyanakkora üzemidő mellett mindkét komponens kinyerése nagyobb (így a melléktermékek mennyisége pedig kisebb) volt (3. táblázat).

			SZR	KOR
	Üzemidő	min	197	200
	Térfogat	ml	1110	1230
<i>A termék</i>	<i>A móltörtje</i>	-	1,000	1,000
	Kinyerés	%	87,4	96,9
	Térfogat	ml	620	710
<i>B termék</i>	<i>A móltörtje</i>	-	0,000	0,000
	Kinyerés	%	84,9	97,3

3. táblázat: A laboratóriumi kísérletek legfontosabb eredményei

3. tézis

Kapcsolódó publikációk: [3]

A KOR hatékonyságát homoazeotrop elegy esetén, benzol helyett ciklohexán hordozót alkalmazva, részletes modellezéssel összehasonlítottam a SZR-ével.

Megállapítottam, hogy izopropanol – víz elegy feldolgozása során benzol helyett ciklohexánt alkalmazva a KOR előnye tovább nő a SZR-val szemben (4. táblázat). Ciklohexánt használva a KOR esetén a műveleti idő jóval rövidebb, a termékek kinyerése pedig jóval nagyobb volt. A KOR-re vonatkozó oszlopokban több adat is szerepel, mert e konfiguráció több változatát is megvizsgáltam (pl. a SZR-ével azonos össz-, ill. oszloponkénti tányérszám).

		Benzol		Ciklohexán	
		SZR	KOR	SZR	KOR
			34,0		28,5
Üzemidő	h	36,45	35,0	37,9	28,8
			33,7		28,8
			58,70		59,33
A termék	kmol	55,97	57,52	50,75	58,78
			59,45		58,78
			29,32		25,46
B termék	kmol	23,59	23,99	21,30	26,16
			26,06		26,16

4. táblázat: A különböző konfigurációk összehasonlítása különböző hordozók alkalmazásával

4. tézis

Kapcsolódó publikációk: [1]

Összefüggést vezettem le a kevesebb mellékterméket eredményező terméksorrend meghatározására kétfázisú binér (A - B) heteroazeotrop elegy szakaszos rektifikálóban való feldolgozására anyagmérleg-egyenletek alapján. Az összefüggésben szerepel a sarzsösszetétel, a kölcsönös oldékonyságok és az előírt terméktisztaságok.

Ha az alábbi egyenlőtlenség teljesül, akkor elsőként az A -ban dús fázis feldolgozásával az A komponenst kell gyártani:

$$x_{ch,A} \geq \frac{\frac{x_A^{ProdA}}{x_A^{Ar}} - \frac{1 - x_B^{ProdB}}{x_A^{Br}}}{\left(x_A^{ProdA} - x_A^{Ar}\right) - \left(1 - x_B^{ProdB} - x_A^{Br}\right)} \cdot x_A^{Ar} \cdot x_A^{Br} = x_{ch,A}^{min} \quad (1)$$

ahol $x_{ch,A}$ az A komponens móltörtje a sarzsban,
 x_A^{Ar}, x_A^{Br} az A komponens móltörtje az A -ban, valamint a B -ben dús fázisban,
 x_A^{ProdA}, x_B^{ProdB} a célkomponens móltörtje az egyes termékekben.

Meg kell még említeni, hogy a fenti szabály független a fejgőz összetételétől, azaz annak nem szükséges azeotropnak lennie.

Ha tiszta termékeket tételezünk fel ($x_A^{ProdA} = 1, x_B^{ProdB} = 1$), az (1) egyenlőtlenség az alábbi alakúra egyszerűsödik:

$$x_{ch,A} \geq \frac{1}{1 + \frac{1 - x_A^{Ar}}{x_A^{Br}}} = x_{ch,A}^{min} \quad (2)$$

5. tézis

Kapcsolódó publikációk: [2], [4], [5], [8]

A KOR-t kiterjesztettük nagyobb szabadsági fokú, rugalmasabban üzemeltethető általánosított kétoszlopos rendszerré (ÁKOR, 2. ábra), melynél már az α és β oszlopok betáplálási helye, valamint a β oszlop refluxaránya is változtatható. A korábban alkalmazott megvalósíthatósági módszert kiterjesztettem az ÁKOR-re, melynek alapján megvalósíthatósági vizsgálatot végeztem.

A vizsgálat eredménye szerint ez a konfiguráció is megvalósíthatónak bizonyult.

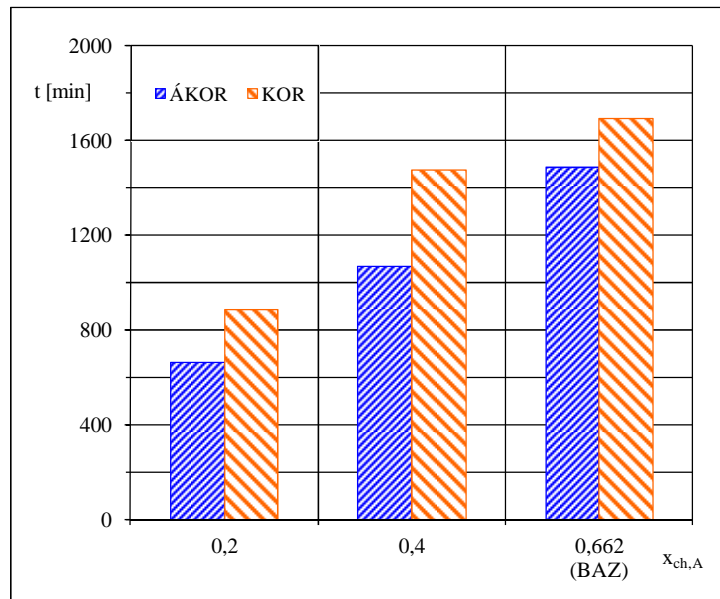
Részletes modellezéssel megvizsgáltam a fenti három új műveleti paraméternek az üzemidőre (a folyamat energiaigényére) gyakorolt hatását három különböző összetételű sarzsra ciklohexán hordozó alkalmazása mellett.

Részletes modellezéssel három különböző sarzsösszetételre és két különböző hordozóra (ciklohexán, n-hexán) downhill-szimplex módszerrel meghatároztam a minimális üzemidőket, és az új műveleti paraméterek optimális értékét.

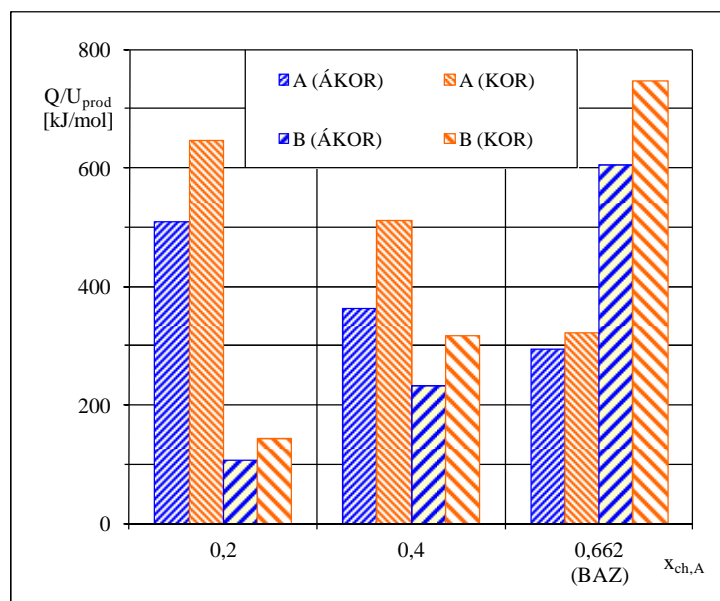
A vizsgálatokból megállapítottam, hogy:

- Az α oszlopban a betáplálás optimális helye az oszlop felső részén van.
- A β oszlopban a betáplálás optimális helye az oszlop alsó részén van.
- A β oszlopban a refluxarány optimális értéke alacsony (<1).

A fenti hat esetre meghatároztam a KOR üzemidejét is. Összehasonlítva a KOR-t és az ÁKOR-t megállapítottam, hogy az ÁKOR esetén az üzemidő mindig rövidebb volt (8. ábra), a termékek gyártásának fajlagos energiaigénye pedig 12 esetből 11-ben az ÁKOR esetén volt alacsonyabb (9. ábra).



8. ábra: Minimális üzemidő az egyes konfigurációkra (hordozó: ciklohexán)



9. ábra: Az egyes termékek fajlagos energiaigénye az egyes konfigurációkra
(A: izopropanol, B: víz, E: ciklohexán)

6. tézis

Kapcsolódó publikációk: [2]

Összehasonlítottam az izopropanol-víz elegy lehetséges hordozóit különböző, a gőz-folyadék és folyadék-folyadék egyensúlyi viszonyok és a fizikai tulajdonságok alapján (5. táblázat).

Megállapítottam, hogy a n-hexán minden szempontból kedvezőbb a ciklohexánál, és a legtöbb mutatót tekintve a benzolnál is:

I. A terner azeotrop (TAZ) izopropanol-tartalma alacsonyabb.

II. A terner azeotrop ponton keresztülhaladó egyensúlyi vonal hosszabb.

III. Az izopropanol megoszlása a szerves és a vizes fázis között kedvezőbb.

IV. A víz és az izopropanol terner azeotropbeli móltörtje arányának $\left(\frac{x_{TAZ,B}}{x_{TAZ,A}}\right)$ magas értéke

kedvez a szétválasztásnak. Továbbá jobb, ha a terner azeotrop vizes fázisában – melyet

elveszünk az α oszlopból – a víz és az izopropanol móltörtjének aránya $\left(\frac{x_{TAZ,B}^{AQ}}{x_{TAZ,A}^{AQ}}\right)$ is

magas. Ezen hányadosok összeszorzásával egy szelektivitási mutatót definiáltunk:

$$SI = \frac{x_{TAZ,B}}{x_{TAZ,A}} \cdot \frac{x_{TAZ,B}^{AQ}}{x_{TAZ,A}^{AQ}}$$

V. Az α oszlopban – csak a szerves fázist visszavezetésével is – magasabb refluxarány

$\left(R^\alpha = \frac{n_{TAZ}^{ORG}}{n_{TAZ}^{AQ}}\right)$ biztosítható. (R^α a TAZ szerves és vizes fázisa mólarányának hányadosa.)

VI. A KOR esetén nagyobb BAZ/TAZ aránynál a kondenzátum a heterogén tartományban marad.

VII. Az egyensúlyi fázisok sűrűségkülönbsége ($\Delta\rho$) sokkal nagyobb.

	I	II	III	IV	V	VI	VII
	$x\%_{TAZ,A}$	$l_{TAZ-vonal}$	$\frac{n_{TAZ,A}^{ORG}}{n_{TAZ,A}^{AQ}}$	SI	R^α	$max. \frac{n_{BAZ}}{n_{TAZ}}$	$\Delta\rho$
	mol%	mol%	-	-	-	-	kg/m ³
Ciklohexán	24,8	65,8	3,57	2,43	3,79	0,59	83
N-hexán	19,1	73,2	11,58	6,44	6,86	0,77	232
<i>Benzol</i>	23,8	69,4	2,71	8,76	3,43	1,81	70

5. táblázat: A különböző hordozók összehasonlítása a fázisegyensúlyi viszonyok alapján

Az eredmények alkalmazási lehetőségei, további feladatok

Az általam vizsgált új kétoszlopos szakaszos heteroazeotrop desztillációs konfigurációkkal (KOR, ÁKOR) lehetőség nyílik az azeotropot képező binér folyadékelegyek komponenseinek egyidejű szétválasztására. A vegyiparban és a gyógyszeriparban a hulladék oldószerkelegyek gyakran ilyenek, amelyeket ezzel az eljárással regenerálni lehet, és így lehetővé válik az értékes komponensek újbóli felhasználása.

Az új konfigurációkkal a SZR-hoz képest a legtöbb esetben a termékek rövidebb idő alatt gyárthatók voltak. Ez azt mutatja, hogy jelentős energiamegtakarítást lehet elérni. Az új konfigurációval az üzemidő egyszer sem haladta meg a SZR-ét.

Egy szakaszos üzemben már meglévő oszlopok könnyen összekapcsolhatók KOR-ré vagy ÁKOR-ré, azaz az új konfigurációk nem igényelnek külön beruházást. A KOR-hez az oszlopokat nem szükséges módosítani, és az ÁKOR-hez is csak egyetlen további betáplálási lehetőség kialakítása szükséges a β oszlop alsó szakaszán. Ha szükséges, az oszlopok szerelés nélkül, mindössze néhány szelep állításával ismét szétválaszthatók. Ugyanakkor az új konfigurációk üzemeltetése a SZR-éhoz képest bonyolultabb (sarzs- és fűtéselosztás).

A félüzemi berendezés hiányosságainak megszüntetése után a binér homoazeotrop elegyre érdemes újbóli kísérleteket végezni.

A tézisekhez kapcsolódó közleményeink

a. Cikk nemzetközi IF-os folyóiratban

- [1] Denes, F., Lang, P., Modla, G., Joulia, X.: „New double column system for heteroazeotropic batch distillation”, *Computers and Chemical Engineering*, **33**, 1631-1643 (2009).
- [2] Denes, F., Lang, P., Joulia, X.: „Generalised closed double-column system for batch heteroazeotropic distillation”, *Separation and Purification Technology*, **89**, 297-308 (2012).

b. Cikk nemzetközi folyóiratban

- [3] Denes, F., Lang, P., Joulia, X.: „Heteroazeotropic batch distillation in a new double-column system”, *Chemical Engineering Transactions*, **18**, 713-718, (2009).
- [4] Denes, F., Lang, P., Joulia, X., „Batch Heteroazeotropic Distillation in a New Generalised Double-Column System”, *Chemical Engineering Transactions*, **25**, 725-730 (2011).

c. Cikk nemzetközi konferencia-kiadványban

- [5] Denes, F., Lang, P., Joulia, X., „Nouveaux systèmes de double colonne pour la distillation hétéroazéotrope discontinue”, *CIFQ2011 sur La Thermique des Systèmes*, 40-45 (2011).
- [6] Lang, P., Denes, F., Joulia, X.: „New Configuration for Heteroazeotropic Batch Distillation: I. Feasibility Studies”, *ESCAPE-18, Computer-Aided Chemical Engineering*, **25**, 115-120 (2008).
- [7] Denes, F., Lang, P., Joulia, X., „Experimental validation of a new double-column system for heteroazeotropic batch distillation”, *Distillation & Absorption 2010, IChemE Symposium Series*, 289-294 (2010).
- [8] Denes, F., Lang, P., Joulia, X., „New generalised double-column system for batch heteroazeotropic distillation”, *ESCAPE-21, Computer-Aided Chemical Engineering*, **29**, 366-370 (2011).

- [9] Denes, F., Lang, P., Modla, G., Joulia, X.: „New Configuration for Heteroazeotropic Batch Distillation: II. Rigorous Simulation Results”, *ESCAPE-18, Computer-Aided Chemical Engineering*, **25**, 6 oldal CD-n (2008).

d. Cikk hazai konferencia-kiadványban

- [10] Lang, P., Denes, F., Joulia, X.: „Új szakaszos heteroazeotrop rektifikáló rendszer: I. Megvalósíthatósági vizsgálatok”, *Műszaki Kémiai Napok '08*, 77-83 (2008).
- [11] Lang, P., Denes, F., Joulia, X.: „New Configuration for Heteroazeotropic Batch Distillation: I. Feasibility Studies”, *Gépészet 2008*, 12 oldal CD-n (2008).
- [12] Denes, F., Lang, P., Joulia, X.: „Validation of a new double-column system for heteroazeotropic batch distillation”, *Gépészet 2010*, 559-564 (2010).
- [13] Denes, F., Lang, P., Modla, G.: „New Configuration for Heteroazeotropic Batch Distillation: II. Rigorous Simulation Results”, *Gépészet 2008*, 8 oldal CD-n (2008).
- [14] Lang, P., Denes, F., Modla, G.: „Új szakaszos heteroazeotrop rektifikáló rendszer: II. Részletes modellezési eredmények”, *Műszaki Kémiai Napok '08*, p. 312-318 (2008).

