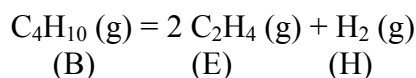


Úloha 1-9 Různé vyjádření reakční rychlosti

Reakce $\text{C}_4\text{H}_{10}(\text{g}) = 2 \text{C}_2\text{H}_4(\text{g}) + \text{H}_2(\text{g})$ probíhá při teplotě 704°C v reaktoru o konstantním objemu, který je na počátku naplněn čistým butanem o tlaku $0,2 \text{ MPa}$. V okamžiku, kdy stupeň přeměny butanu dosahuje 50% , ubývá parciální tlak butanu rychlostí $2,4 \text{ kPa s}^{-1}$. Celková hmotnost všech složek je v tomto okamžiku $53,3 \text{ kg}$. Jakou rychlostí se budou měnit tyto parametry: (a) stupeň přeměny butanu, (b) parciální tlak ethylenu, (c) molární zlomek butanu, (d) látkové množství vodíku?

$$[(a) d\alpha_B/d\tau = 0,012 \text{ s}^{-1}, (b) dp_E/d\tau = 4,8 \text{ kPa s}^{-1}, (c) dx_B/d\tau = -0,009 \text{ s}^{-1}, (d) dn_{\text{H}_2}/d\tau = 11,03 \text{ mol s}^{-1}]$$

Řešení



$$p_0 = p_{\text{B}0} = 0,2 \text{ MPa}$$

$$\alpha_B = 0,5$$

$$\frac{dp_B}{d\tau} = -2,4 \text{ kPa s}^{-1}$$

$$m = 53,3 \text{ kg}$$

$$\text{balance: } \alpha_B = \frac{n_{\text{B}0} - n_B}{n_{\text{B}0}}$$

$$n_B = n_{\text{B}0} - n_{\text{B}0} \cdot \alpha_B$$

$$n_E = 2 n_{\text{B}0} \cdot \alpha_B$$

$$n_H = n_{\text{B}0} \cdot \alpha_B$$

$$n = n_B + n_E + n_H = n_{\text{B}0} - n_{\text{B}0} \cdot \alpha_B + 2 n_{\text{B}0} \cdot \alpha_B + n_{\text{B}0} \cdot \alpha_B = n_{\text{B}0} + 2 n_{\text{B}0} \cdot \alpha_B$$

(a) časová změna stupně přeměny butanu

$$\frac{d\alpha_B}{d\tau} = -\frac{1}{n_{\text{B}0}} \cdot \frac{dn_B}{d\tau}, \quad n_B = \frac{V}{RT} \cdot p_B, \quad n_{\text{B}0} = \frac{V}{RT} \cdot p_{\text{B}0}$$

$$\frac{d\alpha_B}{d\tau} = -\frac{\cancel{RT}}{p_{\text{B}0} \cdot \cancel{V}} \cdot \frac{\cancel{V}}{\cancel{RT}} \cdot \frac{dp_B}{d\tau} = -\frac{1}{p_{\text{B}0}} \cdot \frac{dp_B}{d\tau} = -\frac{1}{0,2 \cdot 10^3} \cdot (-2,4) = 0,012 \text{ s}^{-1}$$

(b) časová změna parciálního tlaku ethylenu

$$p_E = \frac{n_E RT}{V}$$

$$\frac{dp_E}{d\tau} = \frac{RT}{V} \cdot \frac{dn_E}{d\tau}$$

$$\frac{dn_E}{dn_B} = \frac{dn_B}{dn_B}$$

$$\frac{dn_E}{-2} = \frac{dn_B}{+1}, \quad dn_E = -2 dn_B$$

$$\left. \begin{array}{l} \frac{dp_E}{d\tau} = \frac{RT}{V} \cdot \frac{dn_E}{d\tau} \\ \frac{dn_E}{dn_B} = \frac{dn_B}{dn_B} \\ \frac{dn_E}{-2} = \frac{dn_B}{+1}, \quad dn_E = -2 dn_B \end{array} \right\} \frac{dp_E}{d\tau} = \frac{RT}{V} \cdot \frac{(-2 dn_B)}{d\tau} = -2 \frac{dp_B}{d\tau} = -2 \cdot (-2,4) = 4,8 \text{ kPa s}^{-1}$$

(c) Časová změna molárního zlomku butanu

$$x_B = \frac{n_B}{n} = \frac{n_{\text{B}0}(1 - \alpha_B)}{n_{\text{B}0}(1 + 2 \alpha_B)}$$

$$\frac{dx_B}{d\tau} = \frac{-(1 + 2 \alpha_B) - (1 - \alpha_B) \cdot 2}{(1 + 2 \alpha_B)^2} \cdot \frac{d\alpha_B}{d\tau} = -\frac{3}{(1 + 2 \alpha_B)^2} \cdot \frac{d\alpha_B}{d\tau} = -\frac{3}{(1 + 2 \cdot 0,5)} \cdot 0,012 = -0,009 \text{ s}^{-1}$$

(d) časová změna látkového množství vodíku

$$n_{\text{H}_2} = n_{\text{B0}} \cdot \alpha_{\text{B}}$$

$$\frac{dn_{\text{H}_2}}{d\tau} = n_{\text{B0}} \cdot \frac{d\alpha_{\text{B}}}{d\tau}$$

výpočet n_{B0}

$$\begin{aligned} m &= m_{\text{B}} + m_{\text{E}} + m_{\text{H}_2} = n_{\text{B}} \cdot M_{\text{B}} + n_{\text{E}} \cdot M_{\text{E}} + n_{\text{H}_2} \cdot M_{\text{H}_2} \\ &= n_{\text{B0}} \cdot (1 - \alpha_{\text{B}}) \cdot M_{\text{B}} + 2 n_{\text{B0}} \cdot \alpha_{\text{B}} \cdot M_{\text{E}} + n_{\text{B0}} \cdot \alpha_{\text{B}} \cdot M_{\text{H}_2} \end{aligned}$$

$$M_{\text{B}} = 58 \text{ g mol}^{-1}, \quad M_{\text{E}} = 28 \text{ g mol}^{-1}, \quad M_{\text{H}_2} = 2 \text{ g mol}^{-1}$$

$$n_{\text{B0}} = \frac{m}{(1 - \alpha_{\text{B}}) \cdot M_{\text{B}} + 2 \alpha_{\text{B}} \cdot M_{\text{E}} + \alpha_{\text{B}} \cdot M_{\text{H}_2}} = \frac{53,3 \cdot 10^3}{(1 - 0,5) \cdot 58 + 2 \cdot 0,5 \cdot 28 + 0,5 \cdot 2} = 919 \text{ mol}$$

$$\frac{dn_{\text{H}_2}}{d\tau} = n_{\text{B0}} \cdot \frac{d\alpha_{\text{B}}}{d\tau} = 919 \cdot 0,012 = 11,03 \text{ mol s}^{-1}$$