

Úloha 3-25 Bočné rozvětvené reakce prvního řádu

Rychlostní konstanta k_{cF1} ve schematu bočných reakcí prvního řádu



má hodnotu $k_{cF1} = 0,264 \text{ min}^{-1}$. Na počátku obsahuje reaktor pouze výchozí látku R. Po dostatečně dlouhé době, kdy zreaguje veškerá látka R, obsahuje reakční směs 7 mol.% A. Stanovte:

(a) hodnotu rychlostní konstanty k_{c2A} ,

(b) kolik procent R zbude v reakční směsi po 5 minutách od počátku reakce.

[$k_{cA2} = 0,0361 \text{ min}^{-1}$, 26,1 mol.%]

Řešení

Balance: ($c_{U0} = 0$, $c_{F0} = 0$, $c_{B0} = 0$, $c_{A0} = 0$)

$$c_R = c_{R0} - x_1 - x_2$$

$$c_U = {}^{2/5}x_1 = 0,4 x_1$$

$$c_F = 3 x_1$$

$$c_B = x_2$$

$$c_A = {}^{1/5}x_2 = 0,2 x_2$$

$$\begin{aligned} \Sigma c &= c_R + c_U + c_F + c_B + c_A = c_{R0} - x_1 - x_2 + {}^{2/5}x_1 + 3 x_1 + x_2 + {}^{1/5}x_2 \\ &= c_{R0} + 2,4 x_1 + 0,2 x_2 \end{aligned}$$

Diferenciální rovnice:

$$-\frac{dc_R}{d\tau} = k_1 \cdot c_R + k_2 \cdot c_R$$

$$\left. \begin{aligned} +\frac{dc_U}{\frac{2}{5}d\tau} &= \frac{\frac{2}{5}dx_1}{\frac{2}{5}d\tau} = k_1 \cdot c_R, & +\frac{dc_F}{3d\tau} &= \frac{3dx_1}{3d\tau} = k_1 \cdot c_R \\ +\frac{dc_B}{d\tau} &= \frac{dx_2}{d\tau} = k_2 \cdot c_R, & +\frac{dc_A}{\frac{1}{5}d\tau} &= \frac{\frac{1}{5}dx_2}{\frac{1}{5}d\tau} = k_2 \cdot c_R \end{aligned} \right\} \quad \frac{x_1}{x_2} = \frac{k_1}{k_2}$$

Po úplném zreagování R:

$$c_{R\infty} = 0 \Rightarrow c_{R0} - x_{1\infty} - x_{2\infty} = 0, \quad x_{1\infty} = c_{R0} - x_{2\infty}$$

$$c_{A\infty} / \Sigma c = 0,07 \Rightarrow \frac{0,2 x_{2\infty}}{c_{R0} + 2,4 x_{1\infty} + 0,2 x_{2\infty}} = 0,07$$

$$0,2 x_{2\infty} = 0,07 (c_{R0} + 2,4 (c_{R0} - x_{2\infty}) + 0,2 x_{2\infty})$$

$$x_{2\infty} = 0,67232 c_{R0}$$

$$x_{1\infty} = 0,32768 c_{R0} = (1 - 0,67232) c_{R0}$$

$$\frac{k_2}{k_1} = \frac{x_{2\infty}}{x_{1\infty}} = \frac{0,67232 c_{R0}}{0,32768 c_{R0}}$$

(a) Rychlostní konstanty

$$k_1 = \frac{k_{1F}}{|\nu_F|} = \frac{k_{1U}}{|\nu_U|} = \frac{k_{1R}}{|\nu_R|}, \quad k_2 = \frac{k_{2B}}{|\nu_B|} = \frac{k_{2A}}{|\nu_A|} = \frac{k_{2R}}{|\nu_R|}$$

Dáno: $k_{cF1} = 0,264 \text{ min}^{-1}$, $\nu_F = -3$

$$k_1 = \frac{k_{1F}}{|\nu_F|} = \frac{0,264}{3} = 0,088 \text{ min}^{-1} \quad k_2 = 2,05176 k_1 = 2,05176 \cdot 0,088 = 0,18055 \text{ min}^{-1}$$

$$k_{c2} = \frac{k_{c2A}}{|\nu_A|} \Rightarrow k_{c2A} = k_2 \cdot \nu_A = 0,18055 \cdot {}^{1/5} = 0,0361 \text{ min}^{-1}$$

(b) Obsah R (mol.%) v reakční směsi po $\tau = 5 \text{ min}$

$$c_R = c_{R0} \cdot \exp [-(k_1 + k_2) \cdot \tau] = c_{R0} \cdot \exp [-(0,088 + 0,18055) \cdot 5] = 0,26113 c_{R0}$$

$$100 \cdot \frac{c_R}{c_{R0}} = 26,1 \% \text{ původně přítomné R}$$