

Úloha 3-19 Bočné reakce

V soustavě ideálních plynů probíhají při teplotě 602 K reakce



Na počátku reakce obsahoval reaktor čistou složku A o tlaku 200,2 kPa. Vypočtete

(a) dobu, za kterou se koncentrace A zmenší o 24 mol m^{-3}

(b) složení reagující směsi v mol.% v tomto okamžiku.

[(a) 45,81 s; (b) 40 mol.% A; 15 mol.% B; 45 mol.% D]

Řešení:

$$p_{A0} = 200,2 \text{ kPa}, \quad T = 602 \text{ K}, \quad c_{A0} - c_A = 24 \text{ mol m}^{-3}$$

$$k_1 = 0,3 \text{ min}^{-1}, \quad k_2 = 0,015 \text{ s}^{-1} = 0,015 \cdot 60 = 0,9 \text{ min}^{-1}$$

$$c_{A0} = \frac{p_{A0}}{RT} = \frac{200,2 \cdot 10^3}{8,314 \cdot 602} = 40 \text{ mol m}^{-3}$$

$$(a) -\frac{dc_A}{d\tau} = (k_1 + k_2) \cdot c_A$$

$$-\ln \frac{c_A}{c_{A0}} = (k_1 + k_2) \cdot \tau$$

$$\tau = -\frac{1}{(k_1 + k_2)} \ln \frac{c_A}{c_{A0}} = -\frac{1}{(0,3 + 0,9)} \ln \frac{40 - 24}{40} = 0,76358 \text{ min} = 45,8 \text{ s}$$

(b) koncentrace A: $c_A = c_{A0} - 24 \text{ mol m}^{-3} = 40 - 24 = 16 \text{ mol m}^{-3}$

koncentrace produktů - rovnice (3.2-14):

$$\frac{dc_B}{d\tau} = k_1 \cdot c_A = k_1 \cdot c_{A0} \cdot \exp[-(k_1 + k_2) \cdot \tau]$$

$$\begin{aligned} c_B &= \frac{k_1 \cdot c_{A0}}{k_1 + k_2} \cdot (1 - \exp[-(k_1 + k_2) \cdot \tau]) = \frac{k_1}{k_1 + k_2} \cdot (c_{A0} - c_A) \\ &= \frac{0,3}{0,3 + 0,9} \cdot 24 = 6 \text{ mol m}^{-3} \end{aligned}$$

$$\frac{dc_D}{d\tau} = k_2 \cdot c_A = k_2 \cdot c_{A0} \cdot \exp[-(k_1 + k_2) \cdot \tau]$$

$$\begin{aligned} c_D &= \frac{k_2 \cdot c_{A0}}{k_1 + k_2} \cdot (1 - \exp[-(k_1 + k_2) \cdot \tau]) = \frac{k_2}{k_1 + k_2} \cdot (c_{A0} - c_A) \\ &= \frac{0,9}{0,3 + 0,9} \cdot 24 = 18 \text{ mol m}^{-3} \end{aligned}$$

$$\text{nebo} \quad \frac{c_B}{c_D} = \frac{k_1}{k_2} \Rightarrow c_D = \frac{k_2}{k_1} \cdot c_B = \frac{0,9}{0,3} \cdot 6 = 18 \text{ mol m}^{-3}$$

$$\text{Složení směsi: mol.\%} = \frac{c_i}{\sum c} \cdot 100$$

$$\frac{c_A}{\sum c} \cdot 100 = \frac{16}{16 + 6 + 18} \cdot 100 = 40 \text{ mol.\% A}$$

$$\frac{c_B}{\sum c} \cdot 100 = \frac{6}{16 + 6 + 18} \cdot 100 = 15 \text{ mol.\% B}$$

$$\frac{c_D}{\sum c} \cdot 100 = \frac{18}{16 + 6 + 18} \cdot 100 = 45 \text{ mol.\% D}$$