

### Úloha 5-35 Adiabatický reaktor ideálně míchaný a s pístovým tokem

Teplotní závislost rychlostní konstanty reakce  $A(g) + B(g) = R(g)$  je dána vztahem

$$k_c / \text{dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1} = 1,2 \cdot 10^9 \cdot \exp\left(-\frac{105\,620}{RT}\right)$$

Jaký objem průtočného adiabatického reaktoru (a) ideálně promíchávaného, (b) s pístovým tokem bychom potřebovali, máme-li při nástřiku 30 mol směsi (10 mol A + 20 mol B) za hodinu, který vstupuje do reaktoru při teplotě 650 K a tlaku 220 kPa, vyrábět 4 moly R za hodinu. Data:

	A(g)	B(g)	R(g)
$\Delta_{\text{sl}}H^\ominus (300 \text{ K}) / (\text{kJ mol}^{-1})$	-120	-147	-260
$C_{pm} / (\text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1})$	42	24	36

$$[(a) V_{\text{míchaný}} = 7,5587 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3, (b) V_{\text{pístový}} = 7,5445 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3]$$

#### Řešení:

$$k_{cA} = k_{cB} = k_c = 1,2 \cdot 10^9 \cdot \exp\left(-\frac{105\,620}{RT}\right) \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1} = 4,32 \cdot 10^9 \cdot \exp\left(-\frac{105\,620}{RT}\right) \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ h}^{-1}$$

$$T_{\text{vstup}} = 650 \text{ K}, \quad p = 220 \text{ kPa}$$

#### Promíchávaný reaktor:

$$\frac{V}{F} = n_{A0} \cdot \frac{\alpha_A}{r_A}$$

#### Pístový reaktor:

$$\frac{V}{F} = n_{A0} \int_0^{\alpha_A} \frac{d\alpha_A}{r_A}$$

$$\text{kde} \quad r_A = -\frac{dn_A}{V d\tau} = k'_p \cdot p_A \cdot p_B, \quad k'_p = \frac{k_c}{(RT)^2}$$

#### Látková bilance:

$$n_{A0} F = 10 \text{ mol h}^{-1} \text{ - klíčová složka}$$

$$n_{B0} F = 20 \text{ mol h}^{-1} = 2 n_{A0} F$$

$$n_A F = n_{A0} F - n_{A0} F \cdot \alpha_A$$

$$p_A = \frac{1 - \alpha_A}{3 - \alpha_A} \cdot p$$

$$n_B F = n_{B0} F - n_{A0} F \cdot \alpha_A = 2 n_{A0} F - n_{A0} F \cdot \alpha_A$$

$$p_B = \frac{2 - \alpha_A}{3 - \alpha_A} \cdot p$$

$$n_R F = n_{A0} F \cdot \alpha_A = 4 \text{ mol h}^{-1} \Rightarrow \alpha_A = \frac{n_R F}{n_{A0} F} = \frac{4}{10} = 0,4$$

$$n F = 3 n_{A0} F - n_{A0} F \cdot \alpha_A = n_{A0} F \cdot (3 - \alpha_A)$$

#### Entalpická bilance:

Reakční entalpie při 300 K

$$\Delta_r H^\ominus = \Delta_{\text{sl}}H_R^\ominus - \Delta_{\text{sl}}H_A^\ominus - \Delta_{\text{sl}}H_B^\ominus = -260 - (-120) - (-147) = 7 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\begin{aligned} \int_{650}^{300} (n_{A0} F \cdot C_{pmA} + n_{B0} F \cdot C_{pmB}) \cdot dT + n_{A0} F \cdot \alpha_A \cdot \Delta_r H_{300}^\ominus + \\ + \int_{300}^T (n_A F \cdot C_{pmA} + n_B F \cdot C_{pmB} + n_R F \cdot C_{pmR}) dT = 0 \end{aligned}$$

$$(n_{A0} F \cdot C_{pmA} + 2 n_{A0} F \cdot C_{pmB}) \cdot (300 - 650) + n_{A0} F \cdot \alpha_A \cdot \Delta_r H_{300}^\ominus + n_{A0} F \cdot (1 - \alpha_A) \cdot C_{pmA} + \\ + n_{A0} F \cdot (2 - \alpha_A) C_{pmB} + n_{A0} F \cdot \alpha_A \cdot C_{pmR} \cdot (T - 300) = 0$$

$$(C_{pmA} + 2 C_{pmB}) \cdot (-350) + \alpha_A \cdot \Delta_r H_{300}^{\ominus} + (\alpha_A \cdot C_{pmR} + (2 - \alpha_A) C_{pmB} + (1 - \alpha_A) \cdot C_{pmA}) \cdot (T - 300) = 0$$

$$(42 + 2 \cdot 24) \cdot (-350) + \alpha_A \cdot (7000) + (\alpha_A \cdot 36 + (2 - \alpha_A) \cdot 24 + (1 - \alpha_A) \cdot 42) \cdot (T - 300) = 0$$

$$-31500 + 7000 \alpha_A + (36 \alpha_A + 48 - 24 \alpha_A + 42 - 42 \alpha_A) \cdot (T - 300) = 0$$

$$T = 300 + \frac{31500 - 7000 \cdot \alpha_A}{90 - 30 \cdot \alpha_A}$$

(a) Ideálně promíchávaný reaktor

$$n_{A0} F = 10 \text{ mol h}^{-1}$$

$$\alpha_A = 0,4$$

$$T = 300 + \frac{31500 - 7000 \cdot 0,4}{90 - 30 \cdot 0,4} = 667,95 \text{ K}$$

$$V = F \cdot n_{A0} \frac{\alpha_A}{k'_p \cdot p_A \cdot p_B} = F \cdot n_{A0} \frac{\alpha_A}{k'_p \cdot \left( \frac{1 - \alpha_A}{3 - \alpha_A} \cdot p \right) \cdot \left( \frac{2 - \alpha_A}{3 - \alpha_A} \cdot p \right)}$$

$$V = F \cdot n_{A0} \frac{(RT)^2 \cdot (3 - \alpha_A)^2 \alpha_A}{k_c \cdot p^2 \cdot (1 - \alpha_A) \cdot (2 - \alpha_A)} = F \cdot n_{A0} \frac{(RT)^2 \cdot (3 - \alpha_A)^2 \alpha_A}{k_c \cdot p^2 \cdot (1 - \alpha_A) \cdot (2 - \alpha_A)}$$

$$k_c = 4,32 \cdot 10^9 \cdot \exp\left(-\frac{105\,620}{8,314 \cdot 667,95}\right) = 23,743854 \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ h}^{-1}$$

$$V_{\text{michaný}} = 10 \cdot \frac{(8,314 \cdot 667,95)^2 \cdot (3 - 0,4)^2 \cdot 0,4}{23,743854 \cdot (2,2 \cdot 10^5)^2 \cdot (1 - 0,4) \cdot (2 - 0,4)} = 7,5587 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3$$

(b) Reaktor s pístovým tokem

$$V = F \cdot n_{A0} \int_0^{\alpha_A} \frac{d\alpha_A}{k'_p \cdot p_A \cdot p_B} = F \cdot n_{A0} \int_0^{\alpha_A} \frac{d\alpha_A}{k'_p \cdot \left( \frac{1 - \alpha_A}{3 - \alpha_A} \cdot p \right) \cdot \left( \frac{2 - \alpha_A}{3 - \alpha_A} \cdot p \right)}$$

$$= F \cdot n_{A0} \int_0^{\alpha_A} \frac{(RT)^2 \cdot (3 - \alpha_A)^2}{k_c \cdot p^2 \cdot (1 - \alpha_A) \cdot (2 - \alpha_A)} d\alpha_A$$

$$= \frac{F \cdot n_{A0} \cdot R^2}{p^2 \cdot 1,2 \cdot 10^9} \int_0^{\alpha_A} \frac{T^2 \cdot (3 - \alpha_A)^2}{\exp\left(-\frac{105\,620}{8,314 \cdot T}\right) \cdot (1 - \alpha_A) \cdot (2 - \alpha_A)} d\alpha_A$$

$$= \frac{10 \cdot 8,314^2}{3600 \cdot (2,2 \cdot 10^5)^2 \cdot 1,2 \cdot 10^6} \int_0^{\alpha_A} f(\alpha_A, T) d\alpha_A = 3,30591 \cdot 10^{-18} \cdot \int_0^{\alpha_A} f(\alpha_A, T) d\alpha_A$$

$$f(\alpha_A, T) = \frac{T^2 \cdot (3 - \alpha_A)^2}{\exp\left(-\frac{105\,620}{8,314 \cdot T}\right) \cdot (1 - \alpha_A) \cdot (2 - \alpha_A)}$$

(numerická integrace Simpsonovým pravidlem Excel: 3-35.xls)

$$\int_0^{\alpha_A} f(\alpha_A, T) d\alpha_A = 2,28214 \cdot 10^{14}$$

$$V = 3,30591 \cdot 10^{-18} \cdot 2,28214 \cdot 10^{14}$$

$$V_{\text{pístový}} = 7,5445 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3$$