

Úloha 5-23 Následné reakce v průtočném reaktoru

Následná reakce $A \rightarrow B \rightarrow C$ se řídí v obou stupních kinetikou prvního řádu. Za dané teploty mají rychlostní konstanty hodnoty $k_1 = 0,1 \text{ min}^{-1}$ a $k_2 = 0,08 \text{ min}^{-1}$. Reakce probíhá v reaktoru s pístovým tokem objemu 100 dm^3 . Nástřík je tvořen roztokem látky A. Vypočtete

- (a) nástřík, při kterém bude dosaženo konverze výchozí látky $\alpha = 0,32$,
- (b) molární zlomek meziproductu v reakční směsi opouštějící reaktor,
- (c) nástřík, při kterém by bylo dosaženo stejné konverze výchozí látky v průtočném ideálně promíchávaném reaktoru o objemu 100 dm^3 ,
- (d) molární zlomek meziproductu v konečné směsi, vycházející z průtočného míchaného reaktoru (varianta c).

$$[(a) F_V = 25,93 \text{ dm}^3 \text{ min}^{-1}, (b) x_B = 0,2726, (c) F_V = 21,21 \text{ dm}^3 \text{ min}^{-1}, (d) x_B = 0,2325]$$

Řešení:

$$k_1 = 0,1 \text{ min}^{-1}$$

$$k_2 = 0,08 \text{ min}^{-1}$$

$$\alpha = 0,32$$

$$V_R = 100 \text{ dm}^3$$

$$(a) \text{ První reakce: } \frac{V_R}{F_V} = c_{A0} \cdot \int_0^{\alpha} \frac{d\alpha}{r_A} = c_{A0} \cdot \int_0^{\alpha} \frac{d\alpha}{k_1 \cdot c_A} = c_{A0} \cdot \int_0^{\alpha} \frac{d\alpha}{k_1 \cdot c_{A0} \cdot (1-\alpha)} = -\frac{\ln(1-\alpha)}{k_1}$$
$$r_A = k_1 \cdot c_A$$

$$F_V = -\frac{V \cdot k_1}{\ln(1-\alpha)} = -\frac{100 \cdot 0,1}{\ln(1-0,32)} = 25,9294 \text{ dm}^3 \text{ min}^{-1} = 1555,76 \text{ dm}^3 \text{ h}^{-1}$$

(b) Molární zlomek meziproductu B u reaktoru s pístovým tokem

$$\frac{dc_B}{d\tau} = k_1 \cdot c_A - k_2 \cdot c_B$$

$$\frac{V_R}{F_V} = -\int_{c_{A0}}^{\alpha} \frac{dc_A}{k_1 \cdot c_A} = -\frac{1}{k_1} \cdot \ln \frac{c_A}{c_{A0}} \Rightarrow c_A = c_{A0} \cdot e^{-k_1 \frac{V_R}{F_V}}$$

$$\frac{dc_B}{d\tau} = k_1 \cdot c_{A0} \cdot e^{-k_1 \frac{V_R}{F_V}} - k_2 \cdot c_B$$

$$\frac{c_B}{c_{A0}} = \frac{k_1}{k_2 - k_1} \cdot (e^{-k_1 \frac{V_R}{F_V}} - e^{-k_2 \frac{V_R}{F_V}}) = \frac{0,1}{0,08 - 0,1} \cdot (e^{-0,1 \cdot \frac{100}{25,9294}} - e^{-0,08 \cdot \frac{100}{25,9294}}) =$$
$$= \frac{0,1}{(-0,02)} \cdot (0,68 - 0,734526) = 0,27263$$

Molární zlomek meziproductu B ve směsi je $x_B = 0,27263$

(c) Nástřík do promíchávaného reaktoru

$$\frac{V_R}{F_V} = c_{A,0} \cdot \frac{\alpha}{r_A} = c_{A0} \cdot \frac{\alpha}{k_1 \cdot c_A} = c_{A0} \cdot \frac{\alpha}{k_1 \cdot c_{A,0} \cdot (1-\alpha)} = \frac{\alpha}{k_1 \cdot (1-\alpha)}$$

$$F_V = \frac{V_R \cdot k_1 \cdot (1-\alpha)}{\alpha} = \frac{100 \cdot 0,1 \cdot (1-0,32)}{0,32} = 21,21 \text{ dm}^3 \text{ min}^{-1} = 1275 \text{ dm}^3 \text{ h}^{-1}$$

(d) Molární zlomek meziproduktu B u promíchávaného reaktoru

$$\frac{V_R}{F_V} = \frac{c_B}{r_B} = \frac{c_B}{k_1 \cdot c_A - k_2 \cdot c_B}$$

kde

$$r_B = \frac{dc_B}{d\tau} = k_1 \cdot c_A - k_2 \cdot c_B \quad ,$$

$$\frac{V_R}{F_V} = \frac{c_{A0} - c_A}{r_A} = \frac{c_{A0} - c_A}{k_1 \cdot c_A} \quad \Rightarrow \quad c_A = \frac{c_{A0}}{k_1 \cdot \frac{V_R}{F_V} + 1}$$

$$\frac{V_R}{F_V} = \frac{c_B}{k_1 \cdot \frac{c_{A0}}{k_1 \cdot \frac{V_R}{F_V} + 1} - k_2 \cdot c_B}$$

$$k_1 \cdot \frac{V_R}{F_V} \cdot \frac{c_{A0}}{k_1 \cdot \frac{V_R}{F_V} + 1} \cdot \frac{1}{c_B} - k_2 \cdot \frac{V_R}{F_V} = 1$$

$$c_B = \frac{k_1 \cdot \frac{V_R}{F_V} \cdot c_{A,0}}{\left(1 + k_2 \cdot \frac{V_R}{F_V}\right) \cdot \left(k_1 \cdot \frac{V_R}{F_V} + 1\right)}$$

$$\frac{V_R}{F_V} = \frac{100}{21,25} \frac{\text{dm}^3}{\text{dm}^3 \text{ min}^{-1}} = \text{min}$$

$$x_B = \frac{c_B}{c_{A0}} = \frac{0,1 \cdot \frac{100}{21,25}}{\left(1 + 0,08 \cdot \frac{100}{21,25}\right) \cdot \left(0,1 \cdot \frac{100}{21,25} + 1\right)} = 0,23248$$

Molární zlomek meziproduktu B ve směsi je $x_B = 0,2325$