Úloha 5-33 Porovnání adiabatického a izotermního reaktoru

Jednosměrné reakce (I) **A = R** a (II) **A = S** se mají realizovat v průtočném reaktoru, jehož obsah je dokonale promícháván. Posuďte, kterou z reakcí bude výhodnější provádět v adiabatickém a kterou v izotermním uspořádání. V obou případech vstupuje látka A do reaktoru při teplotě 500 K a při stejném tlaku a stejné rychlosti nástřiku se má dosahovat šedesátiprocentní přeměny složky A. Látky A, R a S mají v uvažovaném oboru teplot stejné hodnoty středních tepelných kapacit (C_{pm} = 20 J K^{-1} mol^{-1}) a obě reakce mají stejnou teplotní závislost rychlostní konstanty:

$$k\,/\,\mathrm{h}^{-1} = 6\cdot 10^{6}\cdot \exp\left(-\frac{15\,300}{T}\right)$$

Při teplotě 300 K mají reakční tepla tyto hodnoty:

$$\Delta_r H_{\mathrm{I}}^{\ominus} = 4\ \mathrm{kJ\ mol^{-1}} \quad , \quad \Delta_r H_{\mathrm{II}}^{\ominus} = -4\ \mathrm{kJ\ mol^{-1}}$$

[reakce (I) $V_{izo} < V_{ad}$, reakce (II) $V_{izo} > V_{ad}$]

Řešení:

α_A = 0,6 v obou reakcích

C_{pm} (A) = C_{pm} (R) = C_{pm} (S) = 20 J K^{-1} mol^{-1}

T_0 = 300 K

T_1 = 500 K

Bilance (I) $c_A = c_{A0}\,(1-\alpha_A)$, $c_R = c_{A0}\cdot \alpha_A$ (II) $c_A = c_{A0}\,(1-\alpha_A)$, $c_S = c_{A0}\cdot \alpha_A$

Izotermní reaktor $k_{izo} = 6\cdot 10^{6}\cdot \exp\left(-\dfrac{15\,300}{500}\right)$

$$\frac{V_{izo}}{F_V} = \frac{c_{A0}\cdot\alpha_A}{k_{izo}\cdot c_{A0}\cdot(1-\alpha_A)} \quad , \quad \frac{V_{ad}}{F_V} = \frac{c_{A0}\cdot\alpha_A}{k_{ad}\cdot c_{A0}\cdot(1-\alpha_A)}$$

$$\frac{\dfrac{V_{izo}}{F_V}}{\dfrac{V_{ad}}{F_V}} = \frac{\dfrac{c_{A0}\cdot\alpha_A}{k_{izo}\cdot c_{A0}\cdot(1-\alpha_A)}}{\dfrac{c_{A0}\cdot\alpha_A}{k_{ad}\cdot c_{A0}\cdot(1-\alpha_A)}} \quad\Rightarrow\quad \frac{V_{izo}}{V_{ad}} = \frac{k_{ad}}{k_{izo}}$$

Adiabatický reaktor

reakce (I)

$$Q = 0 = \int_{500}^{300} c_{A0}\cdot C_{pm,A}\,\mathrm{d}T + c_{A0}\cdot\alpha_A\cdot\Delta_r H_{\mathrm{I}}^{\ominus} + \int_{300}^{(T_{ad})_{\mathrm{I}}}\left(c_{A0}\cdot(1-\alpha_A)\cdot C_{pm,A} + c_{A0}\cdot\alpha_A\cdot C_{pm,R}\right)\mathrm{d}T$$

$$20\cdot(300-500) + 0{,}6\cdot 4000 + (0{,}4\cdot 20 + 0{,}6\cdot 20)\cdot((T_{ad})_{\mathrm{I}} - 300) = 0 \quad\Rightarrow\quad (T_{ad})_{\mathrm{I}} = 380\ \mathrm{K}$$

$$(k_{ad})_{\mathrm{I}} = 6\cdot 10^{6}\cdot \exp\left(-\frac{15\,300}{380}\right)$$

$$\left(\frac{V_{izo}}{V_{ad}}\right)_{\mathrm{I}} = \frac{(k_{ad})_{\mathrm{I}}}{k_{izo}} = \frac{6\cdot 10^{6}\cdot\exp\left(-\dfrac{15\,300}{380}\right)}{6\cdot 10^{6}\cdot\exp\left(-\dfrac{15\,300}{500}\right)} = \exp\left[15\,300\left(\frac{1}{500}-\frac{1}{380}\right)\right] = 6{,}358\cdot 10^{-5}$$

reakce (II)

$$Q = 0 = \int_{500}^{300} c_{A0} \cdot C_{pm,A}\, \mathrm{d}T + c_{A0} \cdot \alpha_A \cdot \Delta_r H_{II}^{\ominus} + \int_{300}^{(T_{ad})_{II}} \left(c_{A0} \cdot (1-\alpha_A) \cdot C_{pm,A} + c_{A0} \cdot \alpha_A \cdot C_{pm,S} \right) \mathrm{d}T$$

$20 \cdot (300 - 500) + 0{,}6 \cdot (-4000) + (0{,}4 \cdot 20 + 0{,}6 \cdot 20) \cdot ((T_{ad})_{II} - 300) = 0 \quad \Rightarrow \quad (T_{ad})_{II} = 620\ \mathrm{K}$

$$(k_{ad})_{II} = 6 \cdot 10^6 \cdot \exp\left(-\frac{15\,300}{620} \right)$$

$$\left(\frac{V_{izo}}{V_{ad}} \right)_{II} = \frac{(k_{ad})_{II}}{k_{izo}} = \frac{6 \cdot 10^6 \cdot \exp\left(-\frac{15\,300}{620} \right)}{6 \cdot 10^6 \cdot \exp\left(-\frac{15\,300}{500} \right)} = \exp\left[15\,300 \left(\frac{1}{500} - \frac{1}{620} \right) \right] = 373{,}37$$