

Úloha 5-2 Jednosměrná reakce prvního řádu v průtočném promíchávaném reaktoru

Dimethylether prochází při teplotě 500°C a tlaku 102,5 kPa průtočným dokonale míchaným reaktorem o objemu 0,12 m³. Přitom se ether rozkládá prakticky nevratnou reakcí na methan, oxid uhelnatý a vodík. Do reaktoru se přivádí čistý ether rychlostí 5,52 g/min. Literatura udává rychlostní konstantu tohoto rozkladu vztahem

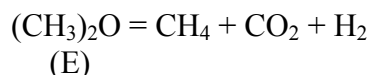
$$k_c / \text{s}^{-1} = 1,55 \cdot 10^{13} \cdot \exp\left(-\frac{29\,441}{T}\right)$$

Vypočtěte, z kolika procent se ether v reaktoru rozloží.

[22,8 %]

Řešení

Reakce:



$$V = 0,12 \text{ m}^3$$

$$T = 773,15 \text{ K}$$

$$p = 102,5 \text{ kPa}$$

$$F = 5,52 \text{ g min}^{-1} = 5,52/60 \text{ g s}^{-1}$$

$$M_E = 46 \text{ g mol}^{-1}, \quad n_{E0} \cdot F = \frac{5,52}{46 \cdot 60} = 0,002 \text{ mol s}^{-1}$$

$$\left[(\text{mol}_E / \text{g}_{\text{nástřik}}) \cdot (\text{g}_{\text{nástřik}} / \text{s}) \right] = \left[\frac{\text{g}_{\text{nástřik}} / \text{s}}{\text{g}_E / \text{mol}_E} \right] = \text{mol}_E / \text{s} \quad (\text{nástřik je čistý ether: } \text{g}_{\text{nástřik}} = \text{g}_E)$$

Průtočný dokonale míchaný reaktor:

$$\frac{V}{F} = n_{E0} \cdot \frac{\alpha_E}{r_E}$$

$$\text{balance:} \quad n_E \cdot F = n_{E0} \cdot F - n_{E0} \cdot F \cdot \alpha = n_{E0} \cdot F (1 - \alpha) \quad p_E = \frac{n_{E0} \cdot F \cdot (1 - \alpha)}{n_{E0} \cdot F \cdot (1 + 2\alpha)} \cdot p$$

$$n_{\text{CH}_4} \cdot F = n_{\text{CO}_2} \cdot F = n_{\text{H}_2} \cdot F = n_{E0} \cdot F \cdot \alpha$$
$$\Sigma n \cdot F = n_{E0} \cdot F \cdot (1 + 2\alpha)$$

$$r_E = k'_p \cdot p_E = k'_p \cdot p \cdot \frac{(1 - \alpha)}{(1 + 2\alpha)}$$

$$\text{rychlostní konstanta } k'_p: \quad \left. \begin{aligned} -\frac{d c_A}{d \tau} &= k_c \cdot c_A \\ -\frac{d c_A}{d \tau} &= k'_p \cdot p_A = k'_p \cdot c_A \cdot RT \end{aligned} \right\} k'_p = \frac{k_c}{RT}$$

$$k'_p = \frac{1,55 \cdot 10^{13}}{8,314 \cdot 773,15} \cdot \exp\left(-\frac{29\,441}{773,15}\right) = 6,992526 \cdot 10^{-8} \text{ mol m}^{-3} \text{ Pa}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$\left[\frac{\text{s}^{-1}}{(\text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}) \cdot \text{K}} = \text{mol J}^{-1} \text{ s}^{-1} = \text{mol m}^{-3} \text{ Pa}^{-1} \text{ s}^{-1} \right]$$

$$\frac{V}{F} = n_{E0} \cdot \frac{\alpha_E \cdot (1 + 2\alpha_E)}{k'_p \cdot p \cdot (1 - \alpha_E)}$$

$$\frac{\alpha_E \cdot (1 + 2\alpha_E)}{(1 - \alpha_E)} = \frac{k'_p \cdot p \cdot V}{n_{E0} \cdot F} = \frac{6,992526 \cdot 10^{-8} \cdot 1,025 \cdot 10^5 \cdot 0,12}{0,002} = 0,43$$

$$\left[\frac{\text{s}^{-1}\cdot\cancel{\text{Pa}}\cdot\text{m}^3}{(\text{mol s}^{-1})\cdot(\cancel{\text{J}}\text{ K}^{-1}\text{ mol}^{-1})\cdot\text{K}}=1\right]$$

$$2\,\alpha_{\text{E}}^2+1,43\cdot\alpha_{\text{E}}-0,43=0$$

$$\alpha_{\text{E}}=0,228$$