Úloha 5-1 Diskontinuální a průtočný reaktor s pístovým tokem

Při zahřívání sulfurylchloridových par v uzavřeném diskontinuálním reaktoru byly při 321°C a počátečním tlaku 101,325 kPa za půl hodiny rozloženy 4 % původně přítomného množství SO_2Cl_2. Disociace sulfurylchloridu na oxid siřičitý a chlor je reakce prvého řádu a není ovlivněna stěnami nádoby. Zpětná reakce je zanedbatelná. Vypočítejte, jak velký průtočný trubkový reaktor při nástřiku 0,5 mol čistého sulfurylchloridu za minutu budete při konstantním tlaku 101,325 kPa potřebovat pro dosažení stejného stupně přeměny. Předpokládejte, že v reaktoru dochází k pístovému toku reagující plynné směsi.

[V = 0,746 m^3]

Řešení

Reakce: $SO_2Cl_2\ (g) = SO_2\ (g) + Cl_2\ (g)$
(A)

Bilance:

$$c_A = c_{A0} - c_{A0} \cdot \alpha$$
$$c_{SO2} = c_{Cl2} = c_{A0} \cdot \alpha$$
$$\Sigma c = c_{A0}\,(1+\alpha)$$

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

$$r_A = -\frac{d\,n_A}{V\,d\,\tau} = k_p' \cdot p_A \quad , \quad p_A = x_A \cdot p = \frac{\cancel{c_{A0}} \cdot (1-\alpha)}{\cancel{c_{A0}} \cdot (1+\alpha)} \cdot p$$

$$r_A = k_p' \cdot \frac{(1-\alpha)}{(1+\alpha)} \cdot p$$

Výpočet rychlostní konstanty k_p:

Diskontinuální reaktor: $$-\frac{d\,c_A}{d\,\tau} = k_c \cdot c_A$$

Průtočný reaktor: $$-\frac{d\,n_A}{V\,d\,\tau} = k_p' \cdot p_A = k_p' \cdot c_A \cdot \boldsymbol{R}T$$

$$\left.\right\} k_p' = \frac{k_c}{\boldsymbol{R}T}$$

$t = 321°C \quad , \quad T = 594{,}15\ K \quad , \quad \alpha = 0{,}04$

$$k_c = \frac{1}{\tau} \cdot \ln \frac{c_{A0}}{c_{A0} - c_{A0} \cdot \alpha} = -\frac{\ln\,(1-\alpha)}{\tau} = -\frac{\ln\,(1-0{,}04)}{30} = 1{,}3607 \cdot 10^{-3}\ \text{min}^{-1}$$

Výpočet objemu průtočného reaktoru

$n_{A0} \cdot F = 0{,}5$ mol min^{-1}

$p = 101{,}325$ kPa

$$V = n_{A0} \cdot F \cdot \int_0^{\alpha_A} \frac{d\alpha_A}{k_p \cdot \frac{(1-\alpha)}{(1+\alpha)} \cdot p} = \frac{n_{A0} \cdot F}{k_p' \cdot p} \int_0^{\alpha_A} \frac{(1+\alpha)}{(1-\alpha)} d\alpha_A = \frac{n_{A0} \cdot F}{k_p \cdot p} \left[-\int_0^{\alpha_A} d\alpha_A + \int_0^{\alpha_A} \frac{2}{(1-\alpha)} d\alpha_A \right]$$

$$V = \frac{n_{A0} \cdot F}{k_p' \cdot p} \cdot \left[-\alpha - 2\ln\,(1-\alpha)\right] =$$

$$= -\frac{n_{A0} \cdot F \cdot \boldsymbol{R}T}{k_c \cdot p} \cdot \left[\alpha + 2 \cdot \ln\,(1-\alpha)\right] = -\frac{0{,}5 \cdot 8{,}314 \cdot 594{,}15}{1{,}3607 \cdot 10^{-3} \cdot 1{,}01325 \cdot 10^5} \cdot \left[0{,}04 + 2 \cdot \ln\,(1-0{,}04)\right]$$

V = 0,746 m^3

$$\left[\frac{(\text{mol min}^{-1})\cdot(\text{J K}^{-1}\text{ mol}^{-1})\cdot\text{K}}{\text{min}^{-1}\cdot\text{Pa}}=\frac{\text{N m}}{\text{N m}^{-2}}=\text{m}^3\right]$$

Nebo

Odst. 10.2: $\delta=\dfrac{\nu_\mathrm{R}-1}{n_0}=\dfrac{2-1}{n_{\mathrm{A}0}}$, $n_0=n_{\mathrm{A}0}$, $k=k_p$

$$\frac{V_\mathrm{R}}{F}=\frac{n_0}{k\cdot p}\left[-\delta\cdot n_{\mathrm{A},0}\cdot\alpha-(1+\delta\cdot n_{\mathrm{A},0})\cdot\ln(1-\alpha)\right]=\frac{n_{A0}}{k_p\cdot p}\left[-\alpha-2\cdot\ln(1-\alpha)\right]$$