

Úloha 5-14 Ideálně promíchávaný reaktor a reaktor s pístovým tokem

Rozklad $2 \text{ NO}_2(\text{g}) = 2 \text{ NO}(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g})$ je reakcí druhého řádu. Při teplotě 873 K má rychlostní konstanta hodnotu $k_{c(\text{NO}_2)} = 30,2 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ min}^{-1}$. Vypočítejte, jak velkého reaktoru (a) ideálně promíchávaného, (b) s pístovým tokem je zapotřebí, abychom dosáhli 60 %ní přeměny NO_2 při nástřiku 6,9 kg čistého NO_2 za hodinu. Reakce probíhá za konstantního tlaku 130 kPa.

$$[(a) V_{R,\text{mích}} = 1,6356 \text{ m}^3, (b) V_{R,\text{píst}} = 1,2643 \text{ m}^3]$$

Řešení:

$$T = 873 \text{ K}, p = 130 \text{ kPa}$$

$$k_{c(\text{NO}_2)} = 30,2 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ min}^{-1} = 30,2 (10^{-1} \text{ m})^3 \text{ mol}^{-1} \left(\frac{\text{h}}{60}\right)^{-1} = 1,812 \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ h}^{-1}$$

$$\text{je pro rychlostní rovnici} \quad r_{\text{NO}_2} = -\frac{dn_{\text{NO}_2}}{V d\tau} = k_{c(\text{NO}_2)} \cdot c_{\text{NO}_2}^2$$

Přepočet rychlostní konstanty:

$$r_{\text{NO}_2} = -\frac{dn_{\text{NO}_2}}{V d\tau} = k_{c(\text{NO}_2)} \cdot c_{\text{NO}_2}^2 = k'_{p(\text{NO}_2)} \cdot p_{\text{NO}_2}^2 \Rightarrow k'_{p(\text{NO}_2)} = \frac{k_{c(\text{NO}_2)}}{(RT)^2}$$
$$= k'_{p(\text{NO}_2)} \cdot c_{\text{NO}_2}^2 \cdot (RT)^2$$

$$k'_{p(\text{NO}_2)} = \frac{1,812}{(8,314 \cdot 873)^2} = 3,4396 \cdot 10^{-8} \text{ mol m}^{-3} \text{ Pa}^{-2} \text{ h}^{-1}$$

$$\alpha_{\text{NO}_2} = 0,6$$

$$F = 6,9 \text{ kg NO}_2 / \text{h}$$

$$(n_{\text{NO}_2})_0 F = \frac{F}{M_{\text{NO}_2}} = \frac{6900}{46} = 150 \text{ mol h}^{-1}$$

$$\text{Balance: } n_{\text{NO}_2} F = (n_{\text{NO}_2})_0 F - (n_{\text{NO}_2})_0 F \cdot \alpha \quad p_{\text{NO}_2} = \frac{1-\alpha}{1+0,5\alpha} \cdot p$$

$$n_{\text{NO}} F = (n_{\text{NO}_2})_0 F \cdot \alpha$$

$$n_{\text{O}_2} F = \frac{1}{2} (n_{\text{NO}_2})_0 F \cdot \alpha$$

$$n F = (n_{\text{NO}_2})_0 F + \frac{1}{2} (n_{\text{NO}_2})_0 F \cdot \alpha$$

(a) Promíchávaný reaktor

$$\frac{V_{R,\text{mích}}}{F} = (n_{\text{NO}_2})_0 \cdot \frac{\alpha}{r_{\text{NO}_2}} = (n_{\text{NO}_2})_0 \cdot \frac{\alpha}{k'_{p(\text{NO}_2)} \cdot p_{\text{NO}_2}^2}$$

$$V_{R,\text{mích}} = (n_{\text{NO}_2})_0 F \cdot \frac{\alpha}{k'_{p(\text{NO}_2)} \cdot \left(\frac{1-\alpha}{1+0,5\alpha} \cdot p\right)^2}$$

$$V_{R,\text{mích}} = 150 \cdot \frac{0,6}{3,4396 \cdot 10^{-8} \cdot \left(\frac{1-0,6}{1+0,5 \cdot 0,6} \cdot 1,3 \cdot 10^5\right)^2} \quad \left[\text{mol h}^{-1} \cdot \frac{1}{(\text{mol m}^{-3} \text{ Pa}^{-2} \text{ h}^{-1}) \cdot \text{Pa}^2} = \text{m}^3 \right]$$

$$V_{R,\text{mích}} = 1,6356 \text{ m}^3$$

(b) Pístový reaktor

$$\begin{aligned}\frac{V_{R,píst}}{F} &= (n_{NO_2})_0 \cdot \int_0^\alpha \frac{d\alpha}{r_{NO_2}} = (n_{NO_2})_0 \cdot \int_0^\alpha \frac{d\alpha}{k'_{p(NO_2)} \cdot p_{NO_2}^2} \\ V_{R,píst} &= \frac{(n_{NO_2})_0 F}{k'_{p(NO_2)}} \cdot \int_0^\alpha \frac{d\alpha}{\left(\frac{1-\alpha}{1+0,5\alpha} \cdot p\right)^2} = \frac{(n_{NO_2})_0 F}{k'_{p(NO_2)} \cdot p^2} \cdot \int_0^\alpha \left(\frac{1+0,5\alpha}{1-\alpha}\right)^2 d\alpha = \\ &= \frac{(n_{NO_2})_0 F}{k'_{p(NO_2)} \cdot p^2} \cdot \int_0^\alpha \left(-0,5 + \frac{1,5}{1-\alpha}\right)^2 d\alpha \\ &= \frac{(n_{NO_2})_0 F}{k'_{p(NO_2)} \cdot p^2} \cdot \int_0^\alpha \left(0,25 - 2 \cdot 0,5 \cdot \frac{1,5}{1-\alpha} + \left(\frac{1,5}{1-\alpha}\right)^2\right) d\alpha \\ &= \frac{(n_{NO_2})_0 F}{k'_{p(NO_2)} \cdot p^2} \cdot \left(0,25 \cdot \alpha - 1,5 \cdot \ln(1-\alpha) + 2,25 \cdot \left(\frac{1}{1-\alpha} - 1\right)\right) \\ &= \frac{150}{3,4396 \cdot 10^{-8} \cdot (1,3 \cdot 10^5)^2} \cdot \left(0,25 \cdot 0,6 - 1,5 \cdot \ln(1-0,6) + 2,25 \cdot \left(\frac{1}{1-0,6} - 1\right)\right)\end{aligned}$$

$$V_{R,píst} = 1,2643 \text{ m}^3$$

nebo použijeme tabulku integrovaných rovnic - kap. 10.3

$$\frac{V_R}{F} = \frac{n_0^2}{k \cdot p^2} \left[\delta^2 \cdot n_{A,0} \cdot \alpha + J \cdot \frac{\alpha}{n_{A,0} \cdot (1-\alpha)} + M \cdot \ln(1-\alpha) + N \cdot \ln\left(1-\alpha \cdot \frac{n_{A,0}}{n_{B,0}}\right) \right]$$

$$\delta = \frac{\nu_R - 2}{2n_0} = \frac{3-2}{2n_0} = \frac{1}{2n_0}$$

$$J = (1 + \delta \cdot n_{A,0})^2 = \left(1 + \frac{1}{2n_0} \cdot n_{A,0}\right)^2 = 2,25 \quad (n_{A,0} = n_0)$$

$$M = 2 \cdot \delta \cdot (1 + \delta \cdot n_{A,0}) = 2 \cdot \frac{1}{2n_0} \cdot \left(1 + \frac{1}{2n_0} \cdot n_0\right) = \frac{1,5}{n_0}$$

$$N = 0$$

$$k = k'_{p(NO_2)}$$

$$\begin{aligned}\frac{V_R}{F} &= \frac{n_0^2}{k'_{p(NO_2)} \cdot p^2} \left[\frac{1}{4n_0^2} \cdot n_{A,0} \cdot \alpha + 2,25 \cdot \frac{\alpha}{n_0 \cdot (1-\alpha)} + \frac{1,5}{n_0} \cdot \ln(1-\alpha) \right] = \\ &= \frac{n_0}{k'_{p(NO_2)} \cdot p^2} \left[\frac{1}{4} \cdot \alpha + 2,25 \cdot \frac{\alpha}{(1-\alpha)} + 1,5 \cdot \ln(1-\alpha) \right]\end{aligned}$$