

Úloha 5-3 Protisměrné reakce oboustranně prvního řádu v průtočném izotermním míchaném reaktoru

V průtočném izotermním míchaném reaktoru, do něhož se přivádí čistá složka A, probíhá při teplotě 623°C homogenní vratná reakce v plynné fázi, $A \rightleftharpoons B$ s šedesáti procentním výtěžkem. Jaký bude výtěžek reakce, proběhne-li tato reakce za jinak nezměněných podmínek v reaktoru 1,5 větším? Při 623°C je $\Delta_r G^\ominus = -17,23 \text{ kJ mol}^{-1}$.

[67,684 %]

Řešení:

$$\Delta_r G^\ominus = -17,23 \text{ kJ mol}^{-1}, \quad T = 896,15 \text{ K}$$

$$K = \exp \left(-\frac{\Delta_r G^\ominus}{RT} \right) = \exp \left(-\frac{(-17\,230)}{8,314 \cdot 896,15} \right) = 10,1$$

$$\text{Rychlostní rovnice: } \frac{V}{F} = \frac{n_{A0} \cdot \alpha_A}{r_A}$$

Bilance:

$$n_A \cdot F = n_{A0} \cdot F (1 - \alpha_A)$$

$$n_B \cdot F = n_{A0} \cdot F \cdot \alpha_A$$

$$\Sigma n \cdot F = n_{A0} \cdot F$$

Parciální tlaky:

$$p_A = \frac{n_{A0} \cdot F \cdot (1 - \alpha_A)}{n_{A0} \cdot F} \cdot p = (1 - \alpha_A) \cdot p$$

$$p_B = \frac{n_{A0} \cdot F \cdot \alpha_A}{n_{A0} \cdot F} \cdot p = \alpha_A \cdot p$$

Reakční rychlost:

$$r_A = -\frac{dc_A}{d\tau} = k'_{p1} \cdot p_A - k'_{p2} \cdot p_B = k'_{p1} \cdot \left[(1 - \alpha_A) \cdot p - \frac{\alpha_A \cdot p}{K} \right] = k'_{p1} \cdot p \cdot \left[1 - \alpha_A \cdot \frac{K+1}{K} \right]$$

$$K_p = \frac{k'_{p1}}{k'_{p2}} = \frac{p_{B,\text{rov}} / p^{\text{st}}}{p_{A,\text{rov}} / p^{\text{st}}} = K$$

$$\frac{V}{n_{A0} \cdot F} = \frac{\alpha_A}{k'_{p1} \cdot p \cdot \left[1 - \alpha_A \cdot \frac{K+1}{K} \right]}$$

$$(n_{A0} \cdot F)_{\text{II}} = (n_{A0} \cdot F)_{\text{I}}$$

$$V_{\text{II}}/V_{\text{I}} = 1,5$$

$$\alpha_{\text{AI}} = 0,6$$

$$\alpha_{\text{AII}} = ?$$

$$\frac{\frac{V_{\text{II}}}{\cancel{n_{A0} \cdot F}}}{\frac{V_{\text{I}}}{\cancel{n_{A0} \cdot F}}} = \frac{\frac{\alpha_{\text{AII}}}{\cancel{k'_{p1} \cdot p} \cdot \left[1 - \alpha_{\text{AII}} \cdot \frac{K+1}{K} \right]}}{\frac{\alpha_{\text{AI}}}{\cancel{k'_{p1} \cdot p} \cdot \left[1 - \alpha_{\text{AI}} \cdot \frac{K+1}{K} \right]}}$$

$$\frac{\alpha_{\text{AII}}}{\left[1 - \alpha_{\text{AII}} \cdot \frac{K+1}{K} \right]} = \frac{V_{\text{II}}}{V_{\text{I}}} \frac{\alpha_{\text{AI}}}{\left[1 - \alpha_{\text{AI}} \cdot \frac{K+1}{K} \right]}$$

$$\frac{\alpha_{\text{AII}}}{\left[1 - \alpha_{\text{AII}} \cdot \frac{11,1}{10,1}\right]} = 1,5 \cdot \frac{0,6}{\left[1 - 0,6 \cdot \frac{11,1}{10,1}\right]} = 2,642442$$

$$\alpha_{\text{AII}} = 2,642442 - 2,90407 \cdot \alpha_{\text{AII}}$$

$$\alpha_{\text{AII}} = 0,67684$$