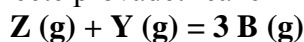


### Úloha 5-38 Adiabatický reaktor ideálně míchaný a s pístovým tokem

V průtočném adiabatickém reaktoru chcete provádět reakci



Rovnovážná konstanta reakce je tak velká, že reakci je možno považovat za prakticky jednosměrnou. Vypočítejte, jaký objem reaktoru (a) s pístovým tokem reagujících látek (b) ideálně promíchaného, je při konstantním tlaku zapotřebí, jestliže do reaktoru uvádíte nástřik tvořený směsí 10 molů Z a 40 molů Y za hodinu při teplotě 550 K a tlaku 120 kPa a chcete dosáhnout 60 %ní přeměny klíčové složky. Pro teplotní závislost rychlostní konstanty uvažované reakce platí vztah

$$k_c / \text{dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ min}^{-1} = 1,44 \cdot 10^{14} \cdot \exp\left(-\frac{126\,300}{RT}\right)$$

Reakce je prvního řádu vzhledem k Z a prvního řádu vzhledem k Y. Data:

	Z(g)	Y(g)	B(g)
$\Delta_{\text{sl}}H^\ominus(300 \text{ K}) / (\text{kJ mol}^{-1})$	-98	-120	-80
$C_{pm} / (\text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1})$	125	92	40

$$[(a) V_{R,\text{michaný}} = 1,622 \text{ dm}^3, (b) V_{R,\text{pístový}} = 3,229 \text{ dm}^3]$$

#### Řešení:

$$n_{Z0} F = 10 \text{ mol h}^{-1}, \quad n_{Y0} F = 40 \text{ mol h}^{-1}$$

$$T_{\text{vstup}} = 550 \text{ K}, \quad p = 120 \text{ kPa}$$

$$\alpha_Z = 0,6$$

Pístový reaktor:

$$\frac{V_{R,\text{píst}}}{F} = n_{Z0} \int_0^{\alpha_Z} \frac{d\alpha_Z}{r_Z}$$

Promíchaný reaktor:

$$\frac{V_{R,\text{mich}}}{F} = n_{Z0} \cdot \frac{\alpha_Z}{r_Z}$$

$$\text{Rychlost reakce:} \quad r_Z = -\frac{dn_Z}{V d\tau} = k'_p \cdot p_Z \cdot p_Y, \quad k'_p = \frac{k_c}{(RT)^2}$$

#### Látková bilance:

$$n_{Z0} F = 10 \text{ mol h}^{-1}$$

$$n_{Y0} F = 40 \text{ mol h}^{-1} (= 4 n_{Z0} F)$$

$$n_Z F = n_{Z0} F - n_{Z0} F \cdot \alpha_Z \text{ (klíčová složka)}$$

$$p_Z = \frac{1 - \alpha_Z}{5 + \alpha_Z} \cdot p$$

$$n_Y F = n_{Y0} F - n_{Z0} F \cdot \alpha_Z = 4 n_{Z0} F - n_{Z0} F \cdot \alpha_Z$$

$$p_Y = \frac{4 - \alpha_Z}{5 + \alpha_Z} \cdot p$$

$$n_B F = 3 n_{Z0} F \cdot \alpha_Z$$

$$p_B = \frac{3 \alpha_Z}{5 + \alpha_Z} \cdot p$$

---


$$n F = 5 n_{Z0} F + n_{Z0} F \cdot \alpha_Z$$

#### Entalpická bilance:

Reakční entalpie při 300 K

$$\Delta_r H^\ominus = 3 \Delta_{\text{sl}}H^\ominus_{\text{B}} - \Delta_{\text{sl}}H^\ominus_{\text{Z}} - \Delta_{\text{sl}}H^\ominus_{\text{Y}} = 3 \cdot (-80) - (-98) - (-120) = -22 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\int_{550}^{300} (n_{Z0} F \cdot C_{pmZ} + n_{Y0} F \cdot C_{pmY}) \cdot dT + n_{Z0} F \cdot \alpha_Z \cdot \Delta_r H^\ominus_{300} + \int_{300}^T (n_Z F \cdot C_{pmZ} + n_Y F \cdot C_{pmY} + n_B F \cdot C_{pmB}) dT = 0$$

$$(n_{Z0} \cdot F \cdot C_{pmZ} + 4 n_{Z0} \cdot F \cdot C_{pmY}) \cdot (300 - 550) + n_{Z0} \cdot F \cdot \alpha_Z \cdot \Delta_r H_{300}^{\ominus} + \\ + [n_{Z0} \cdot F \cdot (1 - \alpha_Z) \cdot C_{pmZ} + n_{Z0} \cdot F \cdot (4 - \alpha_Z) \cdot C_{pmY} + 3 n_{Z0} \cdot F \cdot \alpha_Z \cdot C_{pmB}] \cdot (T - 300) = 0$$

$$(C_{pmZ} + 4 C_{pmY}) \cdot (-250) + \alpha_Z \cdot \Delta_r H_{300}^{\ominus} + \\ + [C_{pmZ} + 4 C_{pmY} + \alpha_Z \cdot (3 C_{pmB} - C_{pmZ} - C_{pmY})] \cdot (T - 300) = 0$$

$$(125 + 4 \cdot 92) \cdot (-250) + \alpha_Z \cdot (-22\,000) + [125 + 4 \cdot 92 + \alpha_Z \cdot (3 \cdot 40 - 125 - 92)] \cdot (T - 300) = 0 \\ -123250 - 22000 \alpha_A + (493 - 97 \alpha_A) \cdot (T - 300) = 0$$

$$T = 300 + \frac{123250 + 22000 \cdot \alpha_Z}{493 - 97 \cdot \alpha_Z}$$

(a) Reaktor s pístovým tokem

$$V_{R,píst} = n_{Z0} \cdot F \cdot \int_0^{\alpha_Z} \frac{d\alpha_Z}{k'_p \cdot p_Z \cdot p_Y} = \frac{n_{Z0} \cdot F}{p^2} \int_0^{\alpha_R} \frac{d\alpha_Z}{k'_p \cdot \left(\frac{1 - \alpha_Z}{5 + \alpha_Z}\right) \cdot \left(\frac{4 - \alpha_Z}{5 + \alpha_Z}\right)} \\ = \frac{n_{Z0} \cdot F}{p^2} \int_0^{\alpha_R} \frac{(5 + \alpha_Z)^2}{k'_p \cdot (1 - \alpha_Z) \cdot (4 - \alpha_Z)} d\alpha_Z$$

$$k'_p = \frac{8,64 \cdot 10^{12}}{(RT)^2} \cdot \exp\left(-\frac{126\,300}{RT}\right) \text{ mol m}^{-3} \text{ Pa}^{-2} \text{ h}^{-1}$$

$$V_{R,píst} = \frac{n_{Z0} \cdot F}{(A/R^2) \cdot p^2} \cdot \int_0^{\alpha_Z} \frac{T^2 \cdot (5 + \alpha_Z)^2}{\exp\left(-\frac{E^*}{RT}\right) \cdot (1 - \alpha_Z) \cdot (4 - \alpha_Z)} d\alpha_Z = \frac{n_{Z0} \cdot F}{(A/R^2) \cdot p^2} \cdot \int_0^{\alpha_Z} f(T_{ad}, \alpha_Z) d\alpha_Z$$

$$= \frac{10 \cdot 8,314^2}{8,64 \cdot 10^{12} \cdot (1,2 \cdot 10^5)^2} \int_0^{\alpha_Z} f(\alpha_Z, T) d\alpha_Z = 5,555764 \cdot 10^{-21} \cdot \int_0^{\alpha_Z} f(\alpha_Z, T) d\alpha_Z$$

$$f(\alpha_Z, T) = \frac{T^2 \cdot (5 + \alpha_Z)^2}{\exp\left(-\frac{E^*}{RT}\right) \cdot (1 - \alpha_Z) \cdot (4 - \alpha_Z)}$$

(numerická integrace Simpsonovým pravidlem Excel: 5-38.xls)

$$\int_0^{0,6} f(\alpha_Z, T) d\alpha_Z = 5,81262 \cdot 10^{17}$$

$$V = 5,555764 \cdot 10^{-21} \cdot 5,81262 \cdot 10^{17}$$

$$V_{R,pístový} = 3,229 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$$

(b) Ideálně promíchávaný reaktor

$$n_{Z0} F = 10 \text{ mol h}^{-1} \text{ - klíčová složka}$$

$$\alpha_Z = 0,6$$

$$T = 300 + \frac{123250 + 22000 \cdot 0,6}{493 - 97 \cdot 0,6} = 613,82 \text{ K}$$

$$V_{R,mích} = \frac{n_{Z0} \cdot F \cdot \alpha_Z}{k'_p \cdot p_Z \cdot p_Y} = \frac{n_{Z0} \cdot F \cdot \alpha_Z}{k'_p \cdot \left(\frac{1 - \alpha_Z}{5 + \alpha_Z}\right) \cdot p \cdot \left(\frac{4 - \alpha_Z}{5 + \alpha_Z}\right) \cdot p} = \frac{n_{Z0} \cdot F \cdot \alpha_Z \cdot (5 + \alpha_Z)^2}{k'_p \cdot p^2 \cdot (1 - \alpha_Z) \cdot (4 - \alpha_Z)}$$

*Rychlostní konstanta:*

$$k_c = 1,44 \cdot 10^{14} \cdot \exp\left(-\frac{126\,300}{RT}\right) \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ min}^{-1}$$

$$= 1,44 \cdot 10^{14} \cdot 60 \cdot 10^{-3} \cdot \exp\left(-\frac{126\,300}{RT}\right) \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ h}^{-1} = 8,64 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left(-\frac{126\,300}{RT}\right) \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ h}^{-1}$$

$$k'_p = \frac{8,64 \cdot 10^{12}}{(RT)^2} \cdot \exp\left(-\frac{126\,300}{RT}\right) = \frac{8,64 \cdot 10^{12}}{(8,314 \cdot 613,82)^2} \cdot \exp\left(-\frac{126\,300}{8,314 \cdot 613,82}\right) =$$

$$= 5,92366 \cdot 10^{-6} \text{ mol m}^{-3} \text{ Pa}^{-2} \text{ h}^{-1} \left[ \frac{\text{m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ h}^{-1}}{(\text{Pa m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ K}^{-1})^2 \cdot \text{K}^2} = \text{mol m}^{-3} \text{ Pa}^{-2} \text{ h}^{-1} \right]$$

$$V_{mícháný} = \frac{10 \cdot 0,6 \cdot (5 + 0,6)^2}{5,92366 \cdot 10^{-6} \cdot (1,2 \cdot 10^5)^2 \cdot (1 - 0,6) \cdot (4 - 0,6)} = 1,622 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 = 1,622 \text{ dm}^3$$