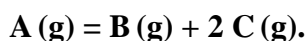


### Úloha 5-9 Pístový a ideálně míchaný homogenní reaktor

Látka A se rozkládá jednosměrnou reakcí podle schématu



Rychlostní konstanta reakce je dána vztahem

$$k_c / (\text{min}^{-1}) = 1,98 \cdot 10^{13} \cdot \exp\left(-\frac{29120}{T}\right)$$

Určete, kolik molů látky C za hodinu může být vyrobeno v dokonale promíchávaném izotermním reaktoru o objemu  $6,2 \text{ dm}^3$ , do něhož je přiváděno 10 molů látky A za hodinu. Reakce probíhá při teplotě  $640^\circ\text{C}$  a konstantním tlaku  $101,3 \text{ kPa}$ . Kolik molů látky C by bylo vyrobeno za jednu hodinu v průtočném reaktoru s pístovým tokem téhož objemu?

$$[(F \cdot n_C)_{\text{míchaný}} = 2,066 \text{ mol C/h}, (F \cdot n_C)_{\text{pístový}} = 2,336 \text{ mol C/h}]$$

### Řešení

$$\begin{aligned} V_R &= 6,2 \text{ dm}^3 = 6,2 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3, \\ T &= 913,15 \text{ K}, \quad p = 101,3 \text{ kPa}, \\ F \cdot n_{A0} &= 10 \text{ mol h}^{-1} \end{aligned}$$

Izotermní průtočné reaktory

*ideálně promíchávaný*

$$\frac{V_R}{F} = \frac{n_{A0} \cdot \alpha}{r} \quad [1]$$

*s pístovým tokem*

$$\frac{V_R}{F} = n_{A0} \cdot \int_0^\alpha \frac{d\alpha}{r} \quad [2]$$

$$r = k'_p \cdot p_A$$

$$\text{Balance:} \quad F \cdot n_A = F \cdot n_{A0} (1 - \alpha) \quad p_A = \frac{1 - \alpha}{1 + 2\alpha} \cdot p$$

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

$$F \cdot n_C = 2 F \cdot n_{A0} \cdot \alpha$$

$$\Sigma F \cdot n = F \cdot n_{A0} (1 + 2\alpha)$$

$$r = k'_p \cdot \frac{1 - \alpha}{1 + 2\alpha} \cdot p$$

Výpočet rychlostní konstanty  $k'_p$

$$\left. \begin{aligned} -\frac{dc_A}{d\tau} &= k_c \cdot c_A \\ -\frac{dn_A}{V d\tau} &= k'_p \cdot p_A = k'_p \cdot c_A \cdot RT \end{aligned} \right\} \quad k'_p = \frac{k_c}{RT}$$

$$\begin{aligned} k'_p &= \frac{1,98 \cdot 10^{13}}{RT} \cdot \exp\left(-\frac{29120}{T}\right) = \frac{1,98 \cdot 10^{13}}{8,314 \cdot 913,15} \cdot \exp\left(-\frac{29120}{913,15}\right) = 3,68833 \cdot 10^{-5} \text{ mol m}^{-3} \text{ Pa}^{-1} \text{ min}^{-1} \\ &= 2,213 \cdot 10^{-3} \text{ mol m}^{-3} \text{ Pa}^{-1} \text{ h}^{-1} \end{aligned}$$

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

### Výpočet stupně přeměny

**Dokonale promíchávaný reaktor** (rovnice [1]) :

$$\frac{V_R}{F} = \frac{n_{A0} \cdot \alpha}{k'_p \cdot \frac{1-\alpha}{1+2\alpha} \cdot p}$$

$$\frac{\alpha \cdot (1+2\alpha)}{1-\alpha} = \frac{V_R \cdot k'_p \cdot p}{n_{A0} \cdot F} = \frac{6,2 \cdot 10^{-3} \cdot 2,213 \cdot 10^{-3} \cdot 1,013 \cdot 10^5}{10} = 0,139$$

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

$$\alpha + 2\alpha^2 = 0,139 - 0,139\alpha$$

$$\alpha^2 + 0,5695\alpha - 0,0695 = 0$$

$$\alpha = -0,28475 \pm (0,28475^2 + 0,0695)^{1/2} = 0,1033$$

$$F \cdot n_C = 2 F \cdot n_{A0} \cdot \alpha = 2 \cdot 10 \cdot 0,1033 = 2,066 \text{ mol C/h}$$

**Reaktor s pístovým tokem** (rovnice [2]):

$$\frac{V_R}{F} = n_{A0} \cdot \int_0^\alpha \frac{d\alpha}{k'_p \cdot \frac{1-\alpha}{1+2\alpha} \cdot p}$$

$$\begin{aligned} \frac{V_R}{F \cdot n_{A0}} &= \frac{1}{k'_p \cdot p} \cdot \int_0^\alpha \frac{1+2\alpha}{1-\alpha} d\alpha = \frac{1}{k'_p \cdot p} \cdot \left[ \int_0^\alpha \frac{1}{1-\alpha} d\alpha - 2 \int_0^\alpha d\alpha + 2 \int_0^\alpha \frac{d\alpha}{1-\alpha} \right] \\ &= \frac{1}{k'_p \cdot p} \cdot [-\ln(1-\alpha) - 2\alpha - 2\ln(1-\alpha)] \end{aligned}$$

Řešení zkusmo

$$\Delta = \frac{V_R \cdot k'_p \cdot p}{F \cdot n_{A0}} + 2\alpha + 3 \ln(1-\alpha) = 0,139 + 2\alpha + 3 \ln(1-\alpha)$$

$$\alpha = 0,116778$$

$$F \cdot n_C = 2 F \cdot n_{A0} \cdot \alpha = 2 \cdot 10 \cdot 0,116778 = 2,3356 \text{ mol C/h}$$