Úloha 5-18 Dokonale míchaný reaktor

Jod může být produkován rozkladem jodovodíku podle rovnice

$$2\ HI\ (g) = H_2\ (g) + I_2\ (g).$$

Rychlostní konstanta přímé reakce je $k_{c(HI)} = 1{,}317 \cdot 10^{-5}$ m^3 mol^{-1} min^{-1} při 393°C a tlaku 102,6 kPa. Rovnovážná konstanta má za těchto podmínek hodnotu $K_a = 0{,}01714$. Rozkladný proces má být prováděn za dané teploty a tlaku v průtočném dokonale promíchávaném reaktoru. Do reaktoru se nastřikují 2 moly jodovodíku za hodinu. Je možno předpokládat ideální chování plynné směsi. Vypočtěte objem reaktoru potřebný k dosažení konverze rovné osmdesáti procentům konverze rovnovážné.

[$V_R = 4{,}17$ m^3]

Řešení:

Pro uvažovanou reakci je $\Sigma \nu_i = 0$. Pro objem a nástřik promíchávaného reaktoru v tomto případě platí

$$\frac{V_R}{F_V} = \frac{(c_{HI})_0 \cdot \alpha}{r_{HI}}$$

$$K_a = 0{,}01714 = \frac{\frac{c_{H_2}}{c^{st}} \cdot \frac{c_{I_2}}{c^{st}}}{\left(\frac{c_{HI}}{c^{st}}\right)^2} = \frac{c_{H_2} \cdot c_{I_2}}{c_{HI}^2} = K_c = \frac{k_{c+}}{k_{c-}}$$

Bilance: $c_{HI} = (c_{HI})_0 - (c_{HI})_0 \cdot \alpha \quad , \quad (c_{HI})_0 = \frac{p}{\boldsymbol{R}T}$

$$c_{H_2} = \tfrac{1}{2}(c_{HI})_0 \cdot \alpha$$

$$c_{I_2} = \tfrac{1}{2}(c_{HI})_0 \cdot \alpha$$

$$\Sigma c = (c_{HI})_0$$

Reakční rychlost (rychlost ubývání jodovodíku):

$$r_{HI} = -\frac{dn_{HI}}{V\ d\tau} = k_{c(HI)+} \cdot (c_{HI})_0^2 \cdot \left((1-\alpha)^2 - \frac{\alpha^2}{4\,K_a}\right)$$

Objem reaktoru

$$V_R = \frac{F_V \cdot (c_{HI})_0 \cdot \alpha}{k_{c(HI)+} \cdot \left(\frac{p}{\boldsymbol{R}T}\right)^2 \cdot \left((1-\alpha)^2 - \frac{\alpha^2}{4\,K_a}\right)}$$

Data:

$\alpha = 0{,}8\ \alpha_{rovn}$

$$K_a = \frac{\left(\frac{\alpha_{rovn}}{2}\right)^2}{(1-\alpha_{rovn})^2} \quad \Rightarrow \quad \alpha_{rovn} = \frac{2 \cdot \sqrt{K_a}}{1 + 2 \cdot \sqrt{K_a}}$$

$$\alpha = 0{,}8 \cdot \frac{2 \cdot \sqrt{0{,}01714}}{1 + 2 \cdot \sqrt{0{,}01714}} = 0{,}8 \cdot 0{,}2075 = 0{,}166$$

$p = 1{,}026 \cdot 10^5$ Pa

$K_a = 0{,}01714$

$k_{c(HI)} = 1{,}317 \cdot 10^{-5}$ m^3 mol^{-1} min^{-1} = $1{,}317 \cdot 10^{-5} \cdot 60 = 7{,}902 \cdot 10^{-4}$ m^3 mol^{-1} h^{-1}

$F_V \cdot (c_{HI})_0 = 2$ mol h^{-1}

$$V_{\mathrm{R}} = \frac{2 \cdot 0{,}166}{7{,}902 \cdot 10^{-4} \cdot \left(\frac{1{,}026 \cdot 10^{5}}{8{,}314 \cdot 666{,}15} \right)^{2} \cdot \left((1-0{,}166)^{2} - \frac{0{,}166^{2}}{4 \cdot 0{,}01714} \right)}$$

$V_{\mathrm{R}} = 4{,}1694\ \mathrm{m}^{3}$

Ke stejnému výsledku dojdeme jiným způsobem:

$$K_{a} = \frac{\frac{p_{\mathrm{H_2}}}{p^{\mathrm{st}}} \cdot \frac{p_{\mathrm{I_2}}}{p^{\mathrm{st}}}}{\left(\frac{p_{\mathrm{HI}}}{p^{\mathrm{st}}} \right)^{2}} = \frac{p_{\mathrm{H_2}} \cdot p_{\mathrm{I_2}}}{p_{\mathrm{HI}}^{2}} = K_{p}$$

$$\frac{V_{\mathrm{R}}}{F} = \frac{(n_{\mathrm{HI}})_{0} \cdot \alpha}{r_{\mathrm{HI}}} = \frac{(n_{\mathrm{HI}})_{0} \cdot \alpha}{k'_{p(\mathrm{HI})+} \cdot p^{2} \left((1-\alpha)^{2} - \frac{\alpha^{2}}{4\,K_{p}} \right)}$$

$$k'_{p(\mathrm{HI})+} = \frac{k_{c(\mathrm{HI})+}}{(\boldsymbol{R}T)^{2}}$$

$$V_{\mathrm{R}} = \frac{F \cdot (n_{\mathrm{HI}})_{0} \cdot \alpha}{k_{c(\mathrm{HI})+} \cdot \left(\frac{p}{\boldsymbol{R}T} \right)^{2} \cdot \left((1-\alpha)^{2} - \frac{\alpha^{2}}{4\,K_{a}} \right)}$$

$(F_{V} \cdot (c_{\mathrm{HI}})_{0} = F \cdot (n_{\mathrm{HI}})_{0})$