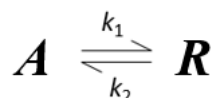


Kjemisk reaksjonsteknikk – TKP4110

Øving 9 – Høst 2021

A reagerer reversibelt til produktet *R* ved



Denne reaksjonen foregår i væskefase og er eksoterm. Følgende data er gitt:

$$C_p = 1000 \text{ kcal/m}^3 \text{K} \quad (\text{constant and independent of } X_A)$$

$$C_{A0} = 3 \text{ kmol/m}^3$$

$$F_{A0} = 6 \text{ kmol/min}$$

$$-r_A = k_1 C_A - k_2 C_R$$

$$k_1 = \exp(17.2 - \frac{E_1}{RT}) [\text{min}^{-1}]$$

$$k_2 = \exp(41.7 - \frac{E_2}{RT}) [\text{min}^{-1}]$$

$$E_1 = 11600 \text{ cal/mol}$$

$$E_2 = 29600 \text{ cal/mol}$$

$$DH_{rx} = -18000 \text{ cal/mol} \quad (\text{regarded as constant})$$

$$R = 8.3144 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

Anta først at reaksjonen er irreversibel

1. Beregn det nødvendige reaktorvolumet for 70% omsetning i en ideell og adiabatisk tankreaktor (CSTR). Fødetemperaturen er 20°C.
2. For å holde temperaturen nede i reaktoren er en kjølespole installert med en total kjøleflate på 100 m². Kjølemediet har en temperatur på 10°C og varmeoverføringstallet er $U = 10000 \text{ cal/m}^2 \cdot \text{min} \cdot \text{K}$. Beregn omsetningen i en CSTR med samme volum og føde som i spørsmål 1.

Nå, ta hensyn til det faktum at reaksjonen er reversibel:

3. Beregn maksimal reaksjonshastighet og tilsvarende temperatur ved en omsetning på 0,7.

Svar: 1) 7.3 m³ 2) $X = 0.26$ 3) 0.72 kmol/min m³, 342.4 K

Øving 9

1 Omgjør R til cal: $1 \text{ J} = 0,239 \text{ cal}$

$$R = 8,3144 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} = 1,987 \frac{\text{cal}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

CSTR: Finner volum ved designlikningen:

$$V = \frac{F_{A0} X}{-r_A}$$

Irrversibel:

$$-r_A = k_A = k_A C_{A0} (1-X) = e^{\left(17,2 - \frac{11600 \text{ cal/mol}}{1,987 \frac{\text{cal}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot T}\right)} C_{A0} (1-X)$$

Trenger T, bruker energibalansen, C_p er konstant (og i volumenhed)

$$\Delta E = \text{Inn} - \text{Ut} + \text{Generert} = 0$$

$$\dot{V}_V C_p T_0 - \dot{V}_V C_p T + (-F_{A0} X \Delta H_{rx}) = 0$$

$$\Rightarrow T = T_0 + \frac{-\Delta H_{rx} \cdot X \cdot F_{A0}}{\dot{V}_V \cdot C_p}$$

$$\dot{V} = \frac{F_{A0}}{C_{A0}} = \frac{6 \text{ kmol/min}}{3 \text{ kmol/m}^3} = 2 \text{ m}^3/\text{min}$$

$$T = 20^\circ\text{C} + \frac{18000 \text{ cal/mol} \cdot 0,7 \cdot 6 \cdot 10^3 \text{ mol/min}}{2 \text{ m}^3/\text{min} \cdot 1000 \cdot 10^3 \text{ cal/m}^3 \cdot \text{K}} = 20^\circ\text{C} + 37,8^\circ\text{C} = 57,8^\circ\text{C} = \underline{330,8 \text{ K}}$$

$$\Rightarrow -r_A = e^{\left(17,2 - \frac{11600 \text{ cal/mol}}{1,987 \frac{\text{cal}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 330,8 \text{ K}}\right)} \left[\text{min}^{-1}\right] \cdot 3 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \cdot (1-0,7) = 0,575 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 \cdot \text{min}}$$

Designlikningen:

$$V = \frac{F_{A0} X}{-r_A} = \frac{6 \text{ kmol/min} \cdot 0,7}{0,575 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 \cdot \text{min}}} = \underline{\underline{7,3 \text{ m}^3}}$$

2

NY EB:

$$UA(T_a - T) + \dot{V}_v C_p T_0 - \dot{V}_v C_p T + (-F_{A0} X \Delta H_{rx}) = 0$$

Løser for X:

$$\Rightarrow X_{EB} = \frac{UA(T_a - T) + \dot{V}_v C_p (T_0 - T)}{F_{A0} \Delta H_{rx}}$$

$$UA = 10\,000 \frac{\text{cal}}{\text{min} \cdot ^\circ\text{K}} \cdot 100 \text{ m}^2 = 1\,000\,000 \frac{\text{cal}}{\text{min} \cdot \text{K}}$$

$$\dot{V}_v C_p = 2 \text{ m}^3/\text{min} \cdot 1000 \cdot 10^3 \text{ cal}/^\circ\text{K} = 2\,000\,000 \frac{\text{cal}}{\text{min} \cdot \text{K}}$$

$$F_{A0} \Delta H_{rx} = 6$$

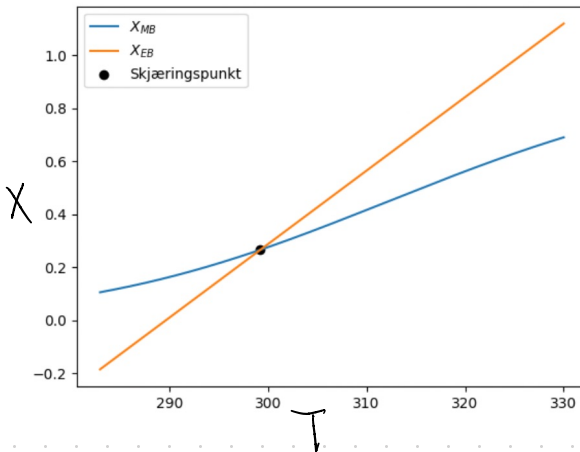
Samme MB:

$$V = \frac{F_{A0} X}{-r_A} = \frac{F_{A0} X}{k_i C_{A0} (1-X)} = \frac{\dot{V}_v X}{k_i (1-X)}$$

Løser for X:

$$X_{MB} = \frac{\frac{\dot{V}_v}{V} k_i}{\frac{\dot{V}_v}{V} k_i + 1} = \frac{3,65 \cdot k_i}{3,65 k_i + 1}, \quad k_i = e^{\left(17,2 - \frac{11600 \text{ cal/mol}}{1,987 \frac{\text{cal}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot T}\right)}$$

Finner skjæringspunktet grafisk:



$$\Rightarrow T = 299,2 \text{ K}$$

$$\underline{X = 0,266}$$

3

reaksjonshastigheten er nå gitt ved:

$$-r_A = k_1 C_A - k_2 C_E$$

$$= k_1 C_{A0} (1-X) - k_2 C_{A0} X$$

$$-r_A = C_{A0} \left((1-X) e^{17,2 - \frac{11600}{1,957 \cdot T}} - X e^{41,7 - \frac{29600}{1,957 \cdot T}} \right)$$

Maximal reaksjonsfart er når $\frac{d(-r_A)}{dT} = 0$

$$\frac{d(-r_A)}{dT} = C_{A0} \left(\frac{11600}{1,957 \cdot T^2} (1-X) e^{17,2 - \frac{11600}{1,957 \cdot T}} - \frac{29600}{1,957 \cdot T^2} X e^{41,7 - \frac{29600}{1,957 \cdot T}} \right) = 0 \quad / : C_{A0}$$

$$\Rightarrow X = \frac{\frac{11600}{1,957 \cdot T^2} e^{17,2 - \frac{11600}{1,957 \cdot T}}}{\frac{11600}{1,957 \cdot T^2} e^{17,2 - \frac{11600}{1,957 \cdot T}} + \frac{29600}{1,957 \cdot T^2} e^{41,7 - \frac{29600}{1,957 \cdot T}}} = 0,7$$

Løser i geogebra $\Rightarrow T = \underline{\underline{344,653 \text{ K}}}$

Setter inn for $-r_A$: $-r_A = C_{A0} \left((1-X) e^{17,2 - \frac{11600}{1,957 \cdot T}} - X e^{41,7 - \frac{29600}{1,957 \cdot T}} \right) / X=0,7, T=344,653 \text{ K}$

$$\Rightarrow \underline{\underline{-r_A = 0,71 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 \cdot \text{min}}}}$$

