

Άσκηση 1

- a) Να βρείτε τη σύσταση εξόδου ενός αντιδραστήρα CSTR όγκου $V = 4 \text{ L}$ μέσα στον οποίο πραγματοποιείται η αντίδραση 1^{ης} τάξης $A \rightarrow B$. Δίνονται $k_1 = 1 \text{ s}^{-1}$, $F_v = 2 \text{ L/s}$, $[A_0] = 2 \text{ mol/L}$
- b) Βρείτε τη νέα σύσταση εξόδου και τη μετατροπή του A , αν αντί για έναν αντιδραστήρα CSTR όγκου 4 L χρησιμοποιήσουμε 4 αντιδραστήρες CSTR σε σειρά όγκου 1 L ο καθένας. Τι συμπέρασμα βγάζετε;
- c) Βρείτε τη νέα σύσταση εξόδου και τη μετατροπή του A αν χρησιμοποιήσουμε:
- i) Έναν αντιδραστήρα CSTR όγκου 3 L και κατόπιν έναν αντιδραστήρα CSTR όγκου 1 L ,
 - ii) έναν αντιδραστήρα CSTR όγκου 1 L και κατόπιν έναν αντιδραστήρα CSTR όγκου 3 L .

Τι συμπεράσματα βγάζετε;

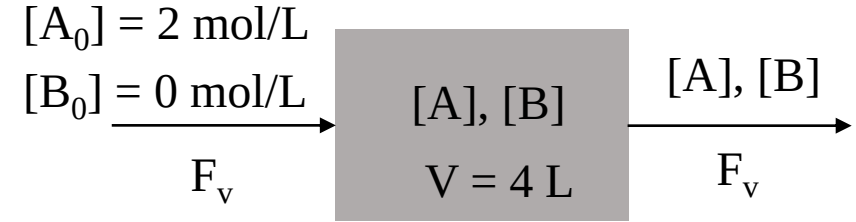
ΛΥΣΗ

a)

CSTR

$$F_{in} = F_{out} = F_v = 2 \text{ L/s}$$

$$\text{Σε Μόνιμη Κατάσταση: } d[A] / dt = 0$$



ΙΣΟΖΥΓΙΟ ΜΑΖΑΣ ΓΙΑ ΤΟ ΑΝΤΙΔΡΩΝ Α

Αντίδραση 1^{ης} τάξης

$$r_A = k_1 [A]$$

$$V \cancel{d[A] / dt}^0 = F_{in}[A_0] - F_{out}[A] - r_A V \Rightarrow 0 = F_{in}[A_0] - F_{out}[A] - k_1 [A] V \Rightarrow$$

$$0 = F_{in}[A_0] - [A](F_{out} + k_1 V) \Rightarrow [A] = F_{in}[A_0] / (F_{out} + k_1 V) \Rightarrow$$

$$[A] = [(2 \text{ L/s}) * (2 \text{ mol/L})] / [2 \text{ L/s} + (1/\text{s}) * (4 \text{ L})] \Rightarrow [A] = 0.6667 \text{ mol/s}$$

ΙΣΟΖΥΓΙΟ ΜΑΖΑΣ ΓΙΑ ΤΟ ΠΡΟΪΟΝ Β

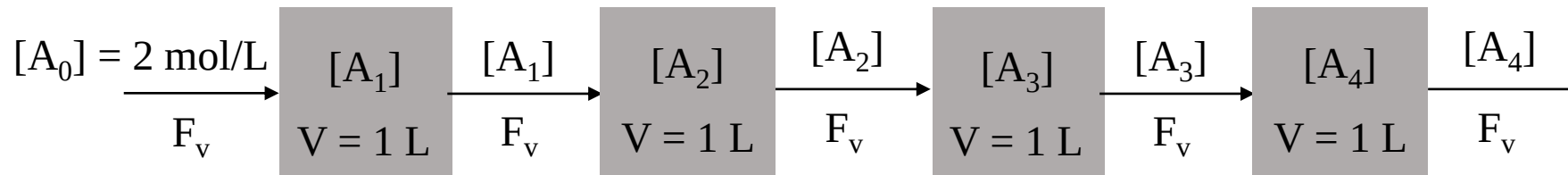
Αντίδραση 1^{ης} τάξης
 $r_A = k_1 [A]$

$$\begin{aligned} V \frac{d[B]}{dt} &= F_{in}[B_0] - F_{out}[B] + r_A V \Rightarrow 0 = 0 - F_{out}[B] + k_1[A]V \Rightarrow \\ [B] &= [A]k_1V / F_{out} \Rightarrow [B] = [(0.6667 \text{ mol/L}) * (4 \text{ L}) * (1/\text{s})] / (2 \text{ L/s}) \Rightarrow \\ [B] &= 1.3333 \text{ mol/s} \end{aligned}$$

Μετατροπή αντιδρώντος A = (Αρχική Συγκέντρωση του A – Συγκέντρωση του A στην έξοδο) / (Αρχική Συγκέντρωση του A) = $([A_0] - [A]) / [A_0]$:

$$\text{Μετατροπή} = (2 - 0.6667) / 2 = 66.67\%$$

b)



ΙΣΟΖΥΓΙΟ ΜΑΖΑΣ ΓΙΑ ΤΟ ΑΝΤΙΔΡΩΝ Α - 1^{ος} ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑΣ

Αντίδραση 1^{ης} τάξης
 $r_A = k_1 [A_1]$

0

$$V \cancel{d[A_1]} / dt = F_{in}[A_o] - F_{out}[A_1] - r_A V \Rightarrow 0 = F_{in}[A_o] - F_{out}[A_1] - k_1 [A_1] V \Rightarrow$$
$$0 = F_{in}[A_o] - [A_1](F_{out} + k_1 V) \Rightarrow [A_1] = F_{in}[A_o] / (F_{out} + k_1 V) \Rightarrow$$
$$[A_1] = [(2L / s) * (2mol / L)] / [2L / s + (1 / s) * (1L)] \Rightarrow [A_1] = 1.333mol / s$$

ΙΣΟΖΥΓΙΟ ΜΑΖΑΣ ΓΙΑ ΤΟ ΑΝΤΙΔΡΩΝ Α - 2^{ος} ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑΣ

0

$$V \cancel{d[A_2]} / dt = F_{in}[A_1] - F_{out}[A_2] - r_A V \Rightarrow 0 = F_{in}[A_1] - F_{out}[A_2] - k_1 [A_2] V \Rightarrow$$
$$0 = F_{in}[A_1] - [A_2](F_{out} + k_1 V) \Rightarrow [A_2] = F_{in}[A_1] / (F_{out} + k_1 V) \Rightarrow$$
$$[A_2] = [(2L / s) * (1.333mol / L)] / [2L / s + (1 / s) * (1L)] \Rightarrow [A_2] = 0.888mol / s$$

ΙΣΟΖΥΓΙΟ ΜΑΖΑΣ ΓΙΑ ΤΟ ΑΝΤΙΔΡΩΝ Α - 3^{ος} ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑΣ

$$\begin{aligned} & \overset{0}{Vd[A_3]/dt} = F_{in}[A_2] - F_{out}[A_3] - r_A V \Rightarrow 0 = F_{in}[A_2] - F_{out}[A_3] - k_1[A_3]V \Rightarrow \\ & 0 = F_{in}[A_2] - [A_3](F_{out} + k_1V) \Rightarrow [A_3] = F_{in}[A_2]/(F_{out} + k_1V) \Rightarrow \\ & [A_3] = [(2L/s) * (0.888mol/L)]/[2L/s + (1/s) * (1L)] \Rightarrow [A_3] = 0.5926mol/s \end{aligned}$$

ΙΣΟΖΥΓΙΟ ΜΑΖΑΣ ΓΙΑ ΤΟ ΑΝΤΙΔΡΩΝ Α - 4^{ος} ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑΣ

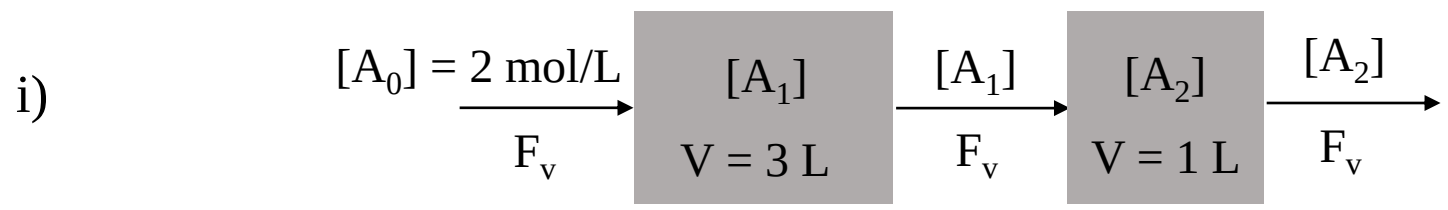
$$\begin{aligned} & \overset{0}{Vd[A_4]/dt} = F_{in}[A_3] - F_{out}[A_4] - r_A V \Rightarrow 0 = F_{in}[A_3] - F_{out}[A_4] - k_1[A_4]V \Rightarrow \\ & 0 = F_{in}[A_3] - [A_4](F_{out} + k_1V) \Rightarrow [A_4] = F_{in}[A_3]/(F_{out} + k_1V) \Rightarrow \\ & [A_4] = [(2L/s) * (0.5926mol/L)]/[2L/s + (1/s) * (1L)] \Rightarrow [A_4] = 0.3951mol/s \end{aligned}$$

Μετατροπή αντιδρώντος A = (Αρχική Συγκέντρωση του A – Συγκέντρωση του A στην έξοδο) / (Αρχική Συγκέντρωση του A) = $([A_0] - [A_4]) / [A_0]$:

Μετατροπή = $(2 - 0.3950) / 2 = 80.25\%$

✓ Παρατηρούμε ότι η τελική μετατροπή του αντιδρώντος A είναι μεγαλύτερη στην περίπτωση όπου χρησιμοποιούμε 4 αντιδραστήρες CSTR σε σειρά με όγκο 1L ο καθένας (συνολικός όγκος 4L), αντί να χρησιμοποιήσουμε έναν μόνο αντιδραστήρα CSTR με όγκο 4L.

c)



ΙΣΟΖΥΓΙΟ ΜΑΖΑΣ ΓΙΑ ΤΟ ΑΝΤΙΔΡΩΝ Α - 1^{ος} ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑΣ

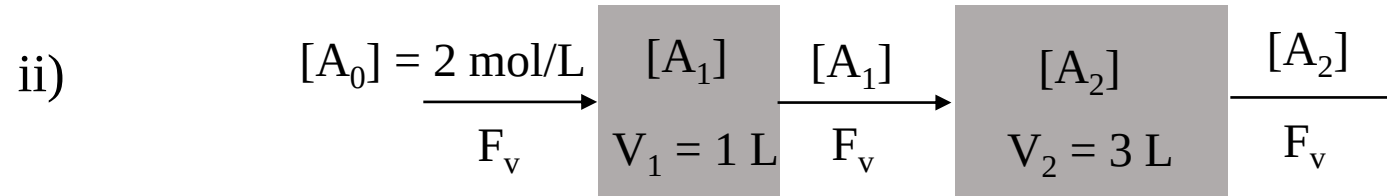
Αντίδραση 1^{ης} τάξης
 $r_A = k_1 [A_1]$

$$V \cancel{d[A_1]/dt}^0 = F_{in}[A_o] - F_{out}[A_1] - r_A V \Rightarrow 0 = F_{in}[A_o] - F_{out}[A_1] - k_1[A_1]V \Rightarrow$$
$$0 = F_{in}[A_o] - [A_1](F_{out} + k_1 V) \Rightarrow [A_1] = F_{in}[A_o] / (F_{out} + k_1 V) \Rightarrow$$
$$[A_1] = [(2L/s) * (2mol/L)] / [2L/s + (1/s) * (3L)] \Rightarrow [A_1] = 0.8mol/s$$

ΙΣΟΖΥΓΙΟ ΜΑΖΑΣ ΓΙΑ ΤΟ ΑΝΤΙΔΡΩΝ Α - 2^{ος} ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑΣ

$$V \cancel{d[A_2]/dt}^0 = F_{in}[A_1] - F_{out}[A_2] - r_A V \Rightarrow 0 = F_{in}[A_1] - F_{out}[A_2] - k_1[A_2]V \Rightarrow$$
$$0 = F_{in}[A_1] - [A_2](F_{out} + k_1 V) \Rightarrow [A_2] = F_{in}[A_1] / (F_{out} + k_1 V) \Rightarrow$$
$$[A_2] = [(2L/s) * (0.8mol/L)] / [2L/s + (1/s) * (1L)] \Rightarrow [A_2] = 0.533mol/s$$

$$\text{Μετατροπή} = (2 - 0.533) / 2 = 73.33\%$$



ΙΣΟΖΥΓΙΟ ΜΑΖΑΣ ΓΙΑ ΤΟ ΑΝΤΙΔΡΩΝ Α - 1^{ος} ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑΣ

Αντίδραση 1^{ης} τάξης
 $r_A = k_1 [A_1]$

$$V \frac{d[A_1]}{dt} = F_{in}[A_0] - F_{out}[A_1] - r_A V_1 \Rightarrow 0 = F_{in}[A_0] - F_{out}[A_1] - k_1 [A_1] V_1 \Rightarrow$$

$$0 = F_{in}[A_0] - [A_1](F_{out} + k_1 V_1) \Rightarrow [A_1] = F_{in}[A_0] / (F_{out} + k_1 V_1) \Rightarrow$$

$$[A_1] = [(2L/s) * (2mol/L)] / [2L/s + (1/s) * (1L)] \Rightarrow [A_1] = 1.333mol/s$$

ΙΣΟΖΥΓΙΟ ΜΑΖΑΣ ΓΙΑ ΤΟ ΑΝΤΙΔΡΩΝ Α - 2^{ος} ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑΣ

$$\begin{aligned} V \frac{d[A_2]}{dt} &= F_{in}[A_1] - F_{out}[A_2] - r_A V_2 \Rightarrow 0 = F_{in}[A_1] - F_{out}[A_2] - k_1[A_2]V_2 \Rightarrow \\ 0 &= F_{in}[A_1] - [A_2](F_{out} + k_1V_2) \Rightarrow [A_2] = F_{in}[A_1] / (F_{out} + k_1V_2) \Rightarrow \\ [A_2] &= [(2L/s) * (1.333mol/L)] / [2L/s + (1/s) * (3L)] \Rightarrow [A_2] = 0.533mol/s \end{aligned}$$

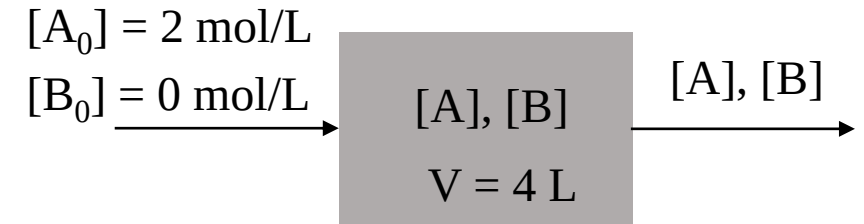
$$\text{Μετατροπή} = (2 - 0.533) / 2 = 73.33\%$$

- ✓ Παρατηρούμε ότι η τελική μετατροπή του αντιδρώντος Α είναι ίδια είτε χρησιμοποιούμε 2 αντιδραστήρες CSTR σε σειρά με όγκο 1L ο πρώτος και 3L ο δεύτερος, είτε χρησιμοποιήσουμε 2 αντιδραστήρες CSTR σε σειρά με όγκο 3L ο πρώτος και 1L ο δεύτερος. Με άλλα λόγια, η μετατροπή του Α δεν επηρεάζεται από την σειρά των αντιδραστήρων CSTR, αλλά από τον όγκο και τον αριθμό τους.

Άσκηση 2

Να επαναλάβετε τα ερωτήματα (a, b και c) της Άσκησης 1 για αντίδραση 2^{ης} τάξης $A \rightarrow B$. Δίνονται $k_2 = 1 \text{ Lmol}^{-1}\text{s}^{-1}$, $F_v = 2 \text{ L/s}$, $[A_0] = 2 \text{ mol/L}$

ΛΥΣΗ



a)

- Η μεθοδολογία και τα ισοζύγια μάζας είναι ακριβώς ίδια για όλα τα ερωτήματα. Το μόνο που αλλάζει είναι η έκφραση του ρυθμού της αντίδρασης: $r_A = k_2 [A]^2$

ΙΣΟΖΥΓΙΟ ΜΑΖΑΣ ΓΙΑ ΤΟ ΑΝΤΙΔΡΩΝ Α

Αντίδραση 2^{ης} τάξης
 $r_A = k_2 [A]^2$

$$V \frac{d[A]}{dt} = F_{in}[A_0] - F_{out}[A] - r_A V \Rightarrow 0 = F_{in}[A_0] - F_{out}[A] - k_2 [A]^2 V \Rightarrow$$
$$0 = 4 - 2[A] - 4 [A]^2 \Rightarrow [A]^2 + 0.5[A] - 1 = 0$$

Διακρίνουσα, $\Delta = (0.5)^2 - 4(-1) = 4.25$ και $\sqrt{\Delta} = 2.06$

$$[A] = \frac{-0.5 \pm 2.06}{2} \left. \begin{array}{l} \rightarrow 0.781 \text{ mol/L} \\ \rightarrow < 0, \text{ απορρίπτεται} \end{array} \right\} \quad \text{Άρα, } [A] = \mathbf{0.781 \text{ mol/L}}$$

ΙΣΟΖΥΓΙΟ ΜΑΖΑΣ ΓΙΑ ΤΟ ΠΡΟΪΟΝ Β

$$V \frac{d[B]}{dt} = F_{in}[B_0] - F_{out}[B] + r_A V \Rightarrow 0 = 0 - F_{out}[B] + k_2 [A]^2 V \Rightarrow$$

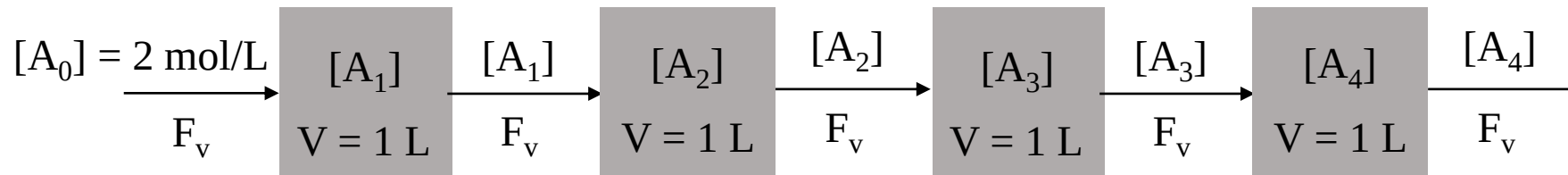
$[B] = 1.22 \text{ mol / L}$

Αντίδραση 2^{ης} τάξης
 $r_A = k_2 [A]^2$

Μετατροπή αντιδρώντος Α = (Αρχική Συγκέντρωση του Α – Συγκέντρωση του Α στην έξοδο) / (Αρχική Συγκέντρωση του Α) = $([A_0] - [A]) / [A_0]$:

$$\text{Μετατροπή} = (2 - 0.781) / 2 = 61 \%$$

b)



ΙΣΟΖΥΓΙΟ ΜΑΖΑΣ ΓΙΑ ΤΟ ΑΝΤΙΔΡΩΝ Α - 1^{ος} ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑΣ

$$\begin{array}{c} 0 \\ \nearrow \\ V \frac{d[A_1]}{dt} = F_{in}[A_o] - F_{out}[A_1] - r_A V \Rightarrow 0 = F_{in}[A_o] - F_{out}[A_1] - k_2 [A_1]^2 V \Rightarrow \\ [A_1]^2 + 2[A_1] - 4 = 0 \end{array}$$

Αντίδραση 2^{ης} τάξης
 $r_A = k_2 [A_1]^2$

Διακρίνουσα, $\Delta = (2)^2 - 4(-4) = 20$ και $\sqrt{\Delta} = 4.47$

$$[A_1] = \frac{-2 \pm 4.47}{2} \left\{ \begin{array}{l} 1.236 \text{ mol/L} \\ < 0, \text{ απορρίπτεται} \end{array} \right\} \quad \text{Άρα, } [A_1] = \mathbf{1.236 \text{ mol/L}}$$

Ομοίως με την Άσκηση 1 καταλήγουμε στα εξής αποτελέσματα:

$$[A_2] = \mathbf{0.863 \text{ mol/L}}, [A_3] = \mathbf{0.651 \text{ mol/L}} \text{ και } [A_4] = \mathbf{0.517 \text{ mol/L}}$$

$$\mathbf{\text{Μετατροπή} = (2 - 0.517) / 2 = 74.15 \%}$$

- ✓ Παρατηρούμε ότι η τελική μετατροπή του αντιδρώντος A (και για αντίδραση 2^{ης} τάξης) είναι μεγαλύτερη στην περίπτωση όπου χρησιμοποιούμε 4 αντιδραστήρες CSTR σε σειρά με όγκο 1L ο καθένας (συνολικός όγκος 4L), αντί να χρησιμοποιήσουμε έναν μόνο αντιδραστήρα CSTR με όγκο 4L.

C) Εφαρμόζοντας τα Ισοζύγια Μάζας για το αντιδρών A προκύπτουν τα εξής αποτελέσματα:

i) $[A_1] = 0.868 \text{ mol/L}$, $[A_2] = 0.654 \text{ mol/L}$ **Μετατροπή = 67.3%**

ii) $[A_1] = 1.236 \text{ mol/L}$, $[A_2] = 0.634 \text{ mol/L}$ **Μετατροπή = 68.3%**

- ✓ Παρατηρούμε ότι η τελική μετατροπή του αντιδρώντος A είναι σχεδόν ίδια είτε χρησιμοποιούμε 2 αντιδραστήρες CSTR σε σειρά με όγκο 1L ο πρώτος και 3L ο δεύτερος, είτε χρησιμοποιήσουμε 2 αντιδραστήρες CSTR σε σειρά με όγκο 3L ο πρώτος και 1L ο δεύτερος.