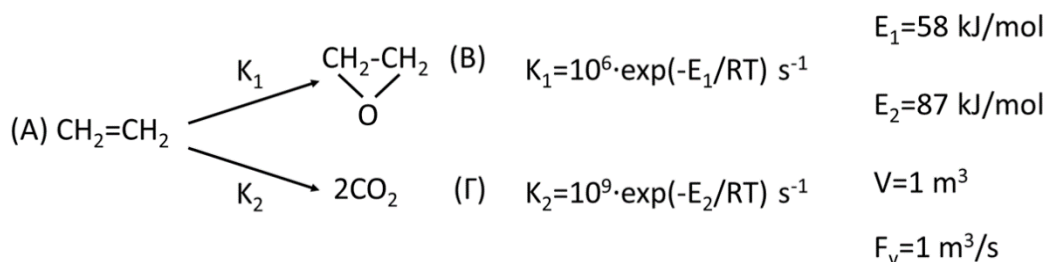


Άσκηση: Ε4 σελίδα: 54 (Βιβλίου)



Αρχικά, εφαρμόζουμε το ισοζύγιο μάζας για το αιθυλένιο (A) και το αιθυλενοξείδιο (B):

$$V \frac{d[A]}{dt} = F_V[A_0] - F_V[A] - r_1 V - r_2 V \Rightarrow$$

$$V \frac{d[A]}{dt} = F_V[A_0] - F_V[A] - k_1[A]V - k_2[A]V \Rightarrow$$

Δεδομένου ότι ο αντιδραστήρας είναι συνεχούς λειτουργίας (CSTR), η συγκέντρωση [A] δεν εμφανίζει εξάρτηση από τον χρόνο, άρα ο όρος στο αριστερό μέλος ισούται με το μηδέν.

$$0 = F_V[A_0] - F_V[A] - k_1[A]V - k_2[A]V \Rightarrow$$

$$0 = F_V[A_0] - [A](F_V + k_1V + k_2V) \Rightarrow$$

$$F_V[A_0] = [A](F_V + k_1V + k_2V) \Rightarrow$$

$$\boxed{[A] = \frac{F_V[A_0]}{(F_V + k_1V + k_2V)} \quad (1)}$$

$$V \frac{d[B]}{dt} = F_V[B_0] - F_V[B] + r_1 V \Rightarrow$$

$$V \frac{d[B]}{dt} = F_V[B_0] - F_V[B] + k_1[A]V \Rightarrow$$

Δεδομένου ότι ο αντιδραστήρας είναι συνεχούς λειτουργίας (CSTR), η συγκέντρωση [B] δεν εμφανίζει εξάρτηση από τον χρόνο, άρα ο όρος στο αριστερό μέλος ισούται με το μηδέν. Παράλληλα, δεν υπάρχει αρχική ποσότητα από το αιθυλενοξείδιο $[B_0]=0$ (για $t=0 \rightarrow [B]=0$).

$$0 = 0 - F_V[B] + k_1[A]V \Rightarrow$$

$$F_V[B] = k_1[A]V \Rightarrow$$

$$[B] = \frac{k_1[A]V}{F_V} \quad (1)$$

$$[B] = \frac{k_1 \frac{F_V [A_0]}{(F_V + k_1 V + k_2 V)} V}{F_V} \Rightarrow$$

$$[B] = \frac{k_1 F_V [A_0] V}{F_V (F_V + k_1 V + k_2 V)} \Rightarrow$$

$$\boxed{[B] = \frac{k_1 [A_0] V}{(F_V + k_1 V + k_2 V)} \quad (2)}$$

Εκφράζοντας την απόδοση γ του αντιδραστήρα σε αιθυλενοξείδιο έχουμε:

$$\gamma = \frac{[B]}{[A_0]} = \frac{k_1 V}{(F_V + k_1 V + k_2 V)} \quad (3)$$

Αν αντικαταστήσουμε τους γνωστούς (F_V, V) στην εξίσωση (3) αφού πρώτα σιγουρευτούμε ότι έχουν κοινές μονάδες μέτρησης θα προκύψει:

$$\gamma = \frac{[B]}{[A_0]} = \frac{k_1}{(1 + k_1 V + k_2 V)}$$

Το ζητούμενο της άσκησης είναι να βρούμε την **άριστη θερμοκρασία λειτουργίας T** του αντιδραστήρα **ώστε να μεγιστοποιηθεί η απόδοση γ σε αιθυλενοξείδιο**. Οπότε, θα υπολογίσουμε την παράγωγο $\frac{d\gamma}{dT} = 0$.

$$\frac{\frac{dk_1}{dT} (1 + k_1 + k_2) - k_1 \left(\frac{dk_1}{dT} + \frac{dk_2}{dT} \right)}{(1 + k_1 + k_2)^2} = 0 \Rightarrow$$

Σε αυτό το σημείο αρκεί ο αριθμητής να ισούται με το μηδέν:

$$\begin{aligned} \frac{dk_1}{dT} (1 + k_1 + k_2) - k_1 \left(\frac{dk_1}{dT} + \frac{dk_2}{dT} \right) &= 0 \Rightarrow \\ \frac{k_1 E_1}{T^2} (1 + k_1 + k_2) - k_1 \left(\frac{k_1 E_1}{T^2} + \frac{k_2 E_2}{T^2} \right) &= 0 \Rightarrow \end{aligned}$$

Επιπλέον $T^2 \neq 0$ και $k_1 \neq 0$:

$$\begin{aligned} E_1 &= k_2 (E_2 - E_1) \Rightarrow \\ \frac{58 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}}{29 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}} &= 10^9 e^{-\frac{87000 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{8.314 \frac{\text{J}}{\text{molK}} T(\text{K})}} \quad \ln \Rightarrow \\ \mathbf{T_{opt} = 523 \text{ K}} \end{aligned}$$