ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΑΣ ΣΕ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΔΙΑΛΕΙΠΟΝΤΟΣ ΕΡΓΟΥ

Έστω ότι εργάζεστε σε μια βιομηχανία και θέλετε να παράγετε 50 tn ενός χημικού προϊόντος Γ ανά 24ωρο. Το προϊόν Γ προκύπτει από την αντίδραση της χημικής ένωσης Α με μια άλλη Β. Η αντίδραση ($A + B \rightarrow \Gamma + \Delta$) γίνεται σε αντιδραστήρες διαλείποντος έργου, όγκου 10 m^3 ο καθένας. Οι αντιδραστήρες φορτώνονται με υδατικό διάλυμα των Α και Β όγκου 8 m^3 ο καθένας. Τα Α και Β όταν αντιδράσουν πλήρως δεν αφήνουν περίσσεια. Να βρεθεί ο αριθμός των αντιδραστήρων που πρέπει να τοποθετηθούν στη βιομηχανία για την παραγωγή της επιθυμητής ποσότητας Γ, αν η σταθερά ταχύτητας της αντίδρασης είναι k=4,7 10^{-4} L/mol min, η αντίδραση δεν είναι αμφίδρομη και υπό την προϋπόθεση ότι από οικονομοτεχνική άποψη συμφέρει να διακόπτεται η λειτουργία του κάθε αντιδραστήρα όταν η μετατροπή του Α φθάνει το 80%. Δίνονται MB_A=60, $MB_Γ$= 116 και ο χρόνος φόρτωσης και εκφόρτωσης κάθε αντιδραστήρα είναι 4 ώρες.

ΛΥΣΗ

Για να βρούμε τον αριθμό των αντιδραστήρων θα πρέπει να υπολογίσουμε το συνολικό όγκο του αντιδρώντος ρευστού που πρέπει να επεξεργαστούμε σε ένα 24ωρο ώστε με ποσοστό μετατροπής 80% να παραχθεί η ζητούμενη ποσότητα προϊόντος Γ.

Η εξίσωση λειτουργίας για έναν Batch αντιδραστήρα σταθερού όγκου (αντίδραση στην υγρή φάση-δεν υπάρχει μεταβολή όγκου) είναι:

$$t = N_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)V} \Rightarrow t = \frac{N_{A0}}{V} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} \qquad (1)$$

Από τις μονάδες της σταθεράς k (L mol^{-1} min^{-1}) συμπεραίνουμε ότι η αντίδραση είναι 2ης τάξης, επομένως μπορούμε να γράψουμε την εξίσωση ταχύτητας στη μορφή:

$$-r_A = kC_AC_B \qquad (2)$$

Επειδή τα Α και Β, όταν αντιδράσουν πλήρως, δεν αφήνουν περίσσεια. Συμπεραίνουμε ότι $C_{A0} = C_{B0}$ και ανά πάσα χρονική στιγμή μέσα στον αντιδραστήρα $C_A = C_B$. Τότε η (2) θα γίνει:

$$-r_A = kC_A^2 \qquad (3)$$

Επειδή, όπως προαναφέραμε, η αντίδραση δεν συνοδεύεται από μεταβολή όγκου (Ειδική Περίπτωση 1) η συγκέντρωση του Α θα δίνεται από τη σχέση:

$$C_A = C_{A0}(1 - X_A) \qquad (4)$$

Αντικαθιστώντας την (4) στην (3) προκύπτει ότι:

$$-r_A = kC_{A0}^2(1 - X_A)^2 \qquad (5)$$

Εισάγοντας την (5) στην (1) προκύπτει:

$$t = \frac{N_{A0}}{V}\int_0^{X_A}\frac{d\,X_A}{kC_{A0}^2(1-X_A)^2} \Rightarrow t = \frac{N_{A0}}{VkC_{A0}^2}\int_0^{X_A}\frac{d\,X_A}{(1-X_A)^2} \xRightarrow{C_{A0}=\frac{N_{A0}}{V}} t = \frac{1}{kC_{A0}}\int_0^{X_A}\frac{d\,X_A}{(1-X_A)^2} \quad \text{ή}$$

$$t = \frac{V}{k\,N_{A0}}\int_0^{0,8}\frac{d\,X_A}{(1-X_A)^2} \qquad (6)$$

Το ολοκλήρωμα: $\int_0^{0,8}\frac{d\,X_A}{(1-X_A)^2} = \left[\frac{1}{1-X_A}\right]_0^{0,8} = \left(\frac{1}{1-0,8} - \frac{1}{1-0}\right) = 5 - 1 = 4$

Άρα η (6) γίνεται:

$$t = \frac{4\,V}{k\,N_{A0}} \Rightarrow V = \frac{t\,k\,N_{A0}}{4} \qquad (7)$$

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΑΣ ΣΕ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΔΙΑΛΕΙΠΟΝΤΟΣ ΕΡΓΟΥ

Θέλουμε 50 τόνους Γ σε ένα 24ωρο. Όμως, ο κάθε αντιδραστήρας θα λειτουργεί για 20 ώρες (24-4),

δηλαδή: $t = 20 \times 60 = 1200 min.$

50 τόνοι Γ = $5x10^7$ g Γ

Από τη στοιχειομετρία της αντίδρασης βλέπουμε ότι

1 mol Α παράγει 1 mol Γ (και με τα μοριακά βάρη ισχύει ότι)

60g Α παράγουν 116 g Γ

Ψ g Α παράγουν $5x10^7$g Γ

Ψ = **25, 862x10^6 g Α** θα πρέπει να καταναλωθούν για να παραχθούν 50 τόνοι Γ.

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΑΣ ΣΕ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΔΙΑΛΕΙΠΟΝΤΟΣ ΕΡΓΟΥ

Θέλουμε 50 τόνους Γ σε ένα 24ωρο. Όμως, ο κάθε αντιδραστήρας θα λειτουργεί για 20 ώρες (24-4),

δηλαδή: $t = 20 \times 60 = 1200 min.$

50 τόνοι Γ = $5x10^7$ g Γ

Από τη στοιχειομετρία της αντίδρασης βλέπουμε ότι

1 mol Α παράγει 1 mol Γ (και με τα μοριακά βάρη ισχύει ότι)

60g Α παράγουν 116 g Γ

Ψ g Α παράγουν $5x10^7$g Γ

Ψ = **25, 862x10^6 g Α** θα πρέπει να καταναλωθούν για να παραχθούν 50 τόνοι Γ.

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΑΣ ΣΕ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΔΙΑΛΕΙΠΟΝΤΟΣ ΕΡΓΟΥ

Επειδή X_A είναι το 80% [(ποσότητα Α που καταναλώθηκε)/(αρχική ποσότητα Α) = 0,8], η παραπάνω ποσότητα του Α αντιστοιχεί σε:

(25,862x10^6 g A)/(0,8) = ***32,328 x10^6 g αρχικού Α***

Επομένως το N_{A0} = (αρχική ποσότητα Α)/(μοριακό βάρος Α) = 32,328 x10^6 g A/60 g/mol = **538.800 mol A**

Αντικαθιστώντας τα παραπάνω μεγέθη στην (7) βρίσκουμε ότι

$$V = \frac{1200 \times 4{,}7 \times 10^{-4} \ \times 538800}{4} = 75970{,}8\ L \cong 76m^3$$

Όμως, ο κάθε αντιδραστήρας φορτώνεται με 8 m^3 άρα θα χρειαστούμε:

$$\frac{76}{8} = 9{,}5 \text{ αντιδραστήρες}$$

Αυτό σημαίνει ότι θα χρησιμοποιήσουμε **10 αντιδραστήρες**.

<u>ΠΡΟΤΑΣΗ</u>

Θα πρότεινα οι 9 να είναι όγκου 10 m^3 και να φορτώνονται με 8 m^3 αντιδρώντος μίγματος και ο ένας να έχει όγκο 5 m^3 και να φορτώνεται με 4 m^3 αντιδρώντος μίγματος.

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΑΣ ΣΕ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΕΜΒΟΛΙΚΗΣ ΡΟΗΣ

Αντιδραστήρας εμβολικής ροής τροφοδοτείται με μίγμα ιδανικών αερίων A_3 και B σε μοριακή αναλογία 2/3 και ογκομετρική παροχή 10 L/min. Το B είναι αδρανές αέριο. Σε θερμοκρασία 215 ^oC και ατμοσφαιρική πίεση συμβαίνει η μη αντιστρεπτή αντίδραση:

$$2A_3 \xrightarrow{k} 3A_2$$

Αν k=2x10^{-4} min^{-1}, να υπολογίσετε τον όγκο του αντιδραστήρα ώστε η συγκέντρωση του A_2 στην έξοδο να είναι 10 mmol/L. (R=0.082 L atm/K mol)

ΛΥΣΗ

Ο όγκος του αντιδραστήρα δίνεται από την εξίσωση (1) σχεδιασμού του αντιδραστήρα

$$\frac{V}{F_{A0}} = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A} \qquad (1)$$

Από τις μονάδες του k προκύπτει ότι η αντίδραση είναι πρώτης τάξης. Επομένως:

$$\frac{kV}{u_0} = -(1+\varepsilon_A)ln(1-X_A) - \varepsilon_A X_A \qquad (2)$$

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΑΣ ΣΕ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΕΜΒΟΛΙΚΗΣ ΡΟΗΣ

Καθώς τα u_0 και k είναι γνωστά, ας υπολογίσουμε το συντελεστή μεταβολής όγκου (ε_A)

$$\varepsilon_A = \frac{V_{X_A=1} - V_{X_A=0}}{V_{X_A=0}} = \frac{6-5}{5} = 0{,}2 \qquad (3)$$

Επειδή χρειαζόμαστε το X_A και γνωρίζουμε την C_{A2} στην έξοδο του αντιδραστήρα θα αξιοποιήσουμε τη σχέση που συνδέει αυτά τα δύο μεγέθη:

$$C_{A_2} = C_{A_{3,0}} \frac{\frac{3}{2}X_A}{1+\varepsilon_A X_A} \longrightarrow X_A = \frac{C_{A_2}}{\frac{3}{2}C_{A_{3,0}} - \varepsilon_A C_{A_2}} \qquad (4)$$

Για να υπολογίσουμε τη X_A από την (4) χρειάζεται να υπολογίσουμε την αρχική συγκέντρωση του A_3.

Για τα ιδανικά αέρια ισχύει:

$$P = C_{o\lambda}RT \longrightarrow C_{o\lambda} = \frac{P}{RT} \longrightarrow C_{o\lambda} = \frac{1}{0{,}082\ x\ 488}\ \frac{mol}{L} = 0{,}025\ \frac{mol}{L} \qquad (5)$$

Επειδή η αναλογία moles των αερίων στην είσοδο του αντιδραστήρα είναι 2/3 ισχύει:

$$C_{A_{3,0}} = \frac{2}{5} C_{o\lambda} = 0{,}010\ \frac{mol}{L} \qquad (6)$$

Αντικαθιστώντας την (6) στην (4) βρίσκουμε ότι

$X_A = 0{,}769$ ή 76,9 % (7)

Αντικαθιστώντας όλα τα γνωστά μεγέθη στην (2) βρίσκουμε

$$\boldsymbol{V = 65{,}58\ L}$$

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΑΣ ΣΕ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΕΜΒΟΛΙΚΗΣ ΡΟΗΣ

Σας ζητείται να σχεδιάσετε αντιδραστήρα εμβολικής ροής για τη θερμική διάσπαση αερίου Α στα αέρια Β και Γ σύμφωνα με την αντίδραση: $4A \longrightarrow B + 6\Gamma$. Η αντίδραση συμφέρει να διεξαχθεί σε θερμοκρασία 550 ^{o}C και πίεση 5 atm.

Η σταθερά ταχύτητας είναι k=2,8x10^{-3}s^{-1}. Η μετατροπή του Α είναι 84% όταν ο αντιδραστήρας τροφοδοτείται με 1 mol A/s.

ΛΥΣΗ

Για να προσδιορίσουμε τον όγκο του συγκεκριμένου αντιδραστήρα θα χρησιμοποιήσουμε την εξίσωση σχεδιασμού του:

$$\frac{V}{F_{A0}} = \int_0^{X_{Af}} \frac{dX_A}{(-r_A)} \Rightarrow V = F_{A0} \int_0^{X_{Af}} \frac{dX_A}{(-r_A)} \qquad (1)$$

Από τις μονάδες του k προκύπτει ότι η αντίδραση είναι πρώτης τάξης. Επομένως:

$$-r_A = k\ C_A \qquad (2)$$

Εισάγοντας την (2) στην (1) έχουμε: $V = F_{A0} \int_0^{X_{Af}} \frac{dX_A}{k\, C_A}$ (3)

Σε συνθήκες σταθερής πίεσης και θερμοκρασίες και καθώς η αντίδραση γίνεται στην αέρια φάση και συνοδεύεται από αλλαγή του αριθμού των moles πηγαίνοντας από το αντιδρών στα προϊόντα ($4A \longrightarrow B + 6\Gamma$) θα συμβαίνει μεταβολή όγκου.

Επομένως: $C_A = C_{A0} \frac{1-X_A}{1+\varepsilon_A X_A}$ (4)

Εισάγοντας την (4) στην (3) προκύπτει: $V = \frac{F_{A0}}{k\, C_{A0}} \int_0^{X_{Af}} \frac{(1+\varepsilon_A X_A)}{(1-X_A)}\, dX_A$ (5)

Από την ολοκλήρωση της (5) προκύπτει: $V = \frac{F_{A0}}{k\, C_{A0}} \left[(1+\varepsilon_A) ln \frac{1}{1-X_{Af}} - \varepsilon_A X_{Af} \right]$ (6)

Υπολογίζουμε το ε_A: $\varepsilon_A = \frac{V_{X_A=1} - V_{X_A=0}}{V_{X_A=0}} = \frac{7-4}{4} = \mathbf{0,75}$ (7)

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΑΣ ΣΕ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΕΜΒΟΛΙΚΗΣ ΡΟΗΣ

Υπολογίζουμε το C_{A0} από την καταστατική εξίσωση των αερίων: $P\,V = n\,R\,T \Rightarrow \frac{n}{V} = \frac{P}{R\,T} \Rightarrow C_{A0} = \frac{P}{R\,T}$ (8)

Αντικαθιστώντας στην (8) R=0,082L atm $K^{-1}mol^{-1}$, P=5atm και T=273+550=823 βρίσκουμε **C_{A0}=0,074 mol L^{-1}**

Εισάγουμε όλα τα γνωστά πλέον μεγέθη στην (6) οπότε προκύπτει ότι **V=12286 L**