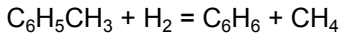


## MB - R - Příklad 5

Benzén sa vyrába v reaktore podľa stechiometrickej rovnice



Do reaktora vstupuje vodík a 12 862 mol/h zmesi, obsahujúcej (v hmot. %) 15 % benzénu, 35 % toluénu a n-alkány. Konverzia reakcie je 70 %-ná a vodík je privádzaný v 300 percentnom nadbytku vzhľadom na teoretické množstvo. Plynné produkty odchádzajú z reaktora a sú chladené v kondenzátore. Mólová hmotnosť n-alkánov je 70 g/mol.

Vypočítajte:

1. Rozsah a teoretický rozsah reakcie, stupeň premeny a teoretické množstvá reaktantov.
2. Hmotnostné toky zložiek opúšťajúce reaktor a zloženie plynných produktov v hmotnostných zlomkoch.
3. Mólový zlomok benzénu v plynných produktoch.

### Bilančná schéma:

$$n_1 = 12.862 \text{ kmol/h}$$



**Definovaný základ výpočtu.**

Na základe informácií zo zadania si ho bude vhodné prepočítať na hmotnostný tok.

$$m_1 = n_1 \cdot M_1$$

1 - zmes uhľovodíkov

$$m_1 = ? \text{ kg/h}$$

$$w_{1A} = 0.15$$

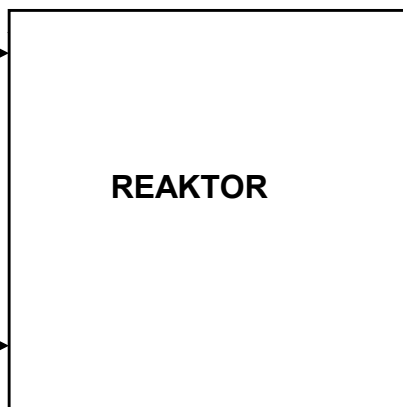
$$w_{1B} = 0.35$$

$$w_{1C} = 0.5$$

2 - vodík

$$m_2 = 4 \cdot m_2^T$$

$$w_{2C} = 1$$



$$\alpha_k = 0.7$$

r - reakčný

3 - produktový prúd

$$m_3 = ? \text{ kg/h}$$

$$w_{3A} = ?$$

$$w_{3B} = ?$$

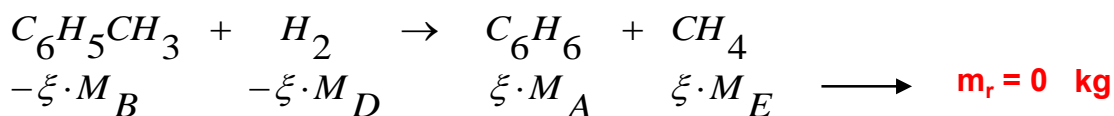
$$w_{3C} = ?$$

$$w_{3D} = ?$$

$$w_{3E} = ?$$

**Zložky:** A – benzén  
B – toluén  
C – n-alkány  
D – vodík  
E – metán

### Stechiometrická rovnica:



## Riešenie:

### Výpočet hmotnostného toku vstupujúcej zmesi uhľovodíkov.

$$m_1 = n_1 \cdot M_1$$

$$M_1 = 1 / (w_{1A}/M_A + w_{1B}/M_B + w_{1C}/M_C)$$

$$M_1 = 77.74966 \text{ kg/kmol}$$

$$n_1 = 12.862 \text{ kmol/h}$$

$$M_A = 78.11 \text{ kg/kmol}$$

$$M_B = 92.14 \text{ kg/kmol}$$

$$M_C = 70 \text{ kg/kmol}$$

$$m_1 = 1000.02 \text{ kg/h}$$

### Určenie limitujúceho reaktanta:

Limitujúcim (kľúčovým) reaktantom je toluén. Vyplýva to zo zadania, lebo druhý reaktant - vodík je privádzaný v štvornásobnom nadbytku na teoretické množstvo.

Keby bol vodík privádzaný v teoretickom množstve, bol by tiež limitujúci reaktant a jeho stupeň premeny by bol rovný stupňu premeny toluénu. Koeficienty nadbytku oboch reaktantov by boli vtedy prirodzene rovné jednej.

$$\alpha_A = \alpha_k = 0.7$$

$$\alpha_D < 0.7$$

Oba reaktanty, keďže nezreagujú na 100 percent, budú zároveň súčasťou odchádzajúceho produktového prúdu.

### Materiálová bilancia reaktora:

Prúdy Zložky	1	2	r	3
A: C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	$m_1 \cdot w_{1A}$ 150.0024		$1 \cdot \xi \cdot M_A$ ?	$m_3 \cdot w_{3A}$ ?
B: C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> CH <sub>3</sub>	$m_1 \cdot w_{1B}$ 350.0056		$(-1) \cdot \xi \cdot M_B$ ?	$m_3 \cdot w_{3B}$ ?
C: n-alk.	$m_1 \cdot w_{1C}$ 500.008			$m_3 \cdot w_{3C}$ ?
D: H <sub>2</sub>		$m_2 \cdot w_{2D}$ ?	$(-1) \cdot \xi \cdot M_D$ ?	$m_3 \cdot w_{3D}$ ?
E: CH <sub>4</sub>			$1 \cdot \xi \cdot M_E$ ?	$m_3 \cdot w_{3D}$ ?
$\Sigma$	$m_1$ 1000.02	$m_2$ ?	$m_r$ 0	$m_3$ ?

### Výpočet rozsahu (rýchlosti) reakcie:

$$\xi = \frac{-\alpha_B \cdot n_{1B}}{V_B} = \frac{-\alpha_B \cdot \frac{m_{1B}}{M_B}}{V_B}$$

$$\begin{aligned} m_{1B} &= 350.0056 \text{ kg/h} \\ M_B &= 92.14 \text{ kg/kmol} \\ v_B &= -1 \\ \alpha_B = \alpha_k &= 0.7 \end{aligned}$$

$$\xi = 2.65904 \text{ kmol/h}$$

### Výpočet teoretického rozsahu (rýchlosti) reakcie:

Limitujúci reaktant by vtedy zreagoval úplne..... Jeho vstupujúce a teoretické množstvo je rovnaké.

$$\xi^T = \frac{-\alpha_B^T \cdot (n_{1B})^T}{V_B} = \frac{-\alpha_B^T \cdot \frac{(m_{1B})^T}{M_B}}{V_B}$$

$$\begin{aligned} m_{1B} = m_{1B}^T &= 350.0056 \text{ kg/h} \\ M_B &= 92.14 \text{ kg/kmol} \\ v_B &= -1 \\ \alpha_B^T &= 1 \end{aligned}$$

$$\xi^T = 3.79863 \text{ kmol/h}$$

### Výpočet zdrojových členov:

A: C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	1*ξ·M <sub>A</sub> 207.6976 kg/h
B: C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> CH <sub>3</sub>	(-1)*ξ·M <sub>B</sub> -245.004 kg/h
D: H <sub>2</sub>	(-1)*ξ·M <sub>D</sub> -5.31808 kg/h
E: CH <sub>4</sub>	1*ξ·M <sub>E</sub> 42.54464 kg/h

$$\begin{aligned} \xi &= 2.65904 \text{ kmol/h} \\ M_A &= 78.11 \text{ kg/kmol} \\ M_B &= 92.14 \text{ kg/kmol} \\ M_D &= 2 \text{ kg/kmol} \\ M_E &= 16 \text{ kg/kmol} \end{aligned}$$

### Výpočet teoretického množstva vodíka:

**Teoretické množstvo reaktanta** je také množstvo limitujúceho reaktanta, ktoré by sa spotrebovalo v reakcii úplne.

Z uvedeného vyplýva, že:

**V prípade limitujúceho reaktanta je jeho skutočné privedené množstvo do systému a teoretické množstvo rovnaké.**

$$n_{i,\text{vstup}} = n_{k,\text{vstup}} = n_{i,\text{vstup}}^T$$

$$m_{i,\text{vstup}} = m_{k,\text{vstup}} = m_{i,\text{vstup}}^T$$

**Pre reaktanty, ktoré sú v nadbytku, je teoretické množstvo menšie ako ako skutočne privedené množstvo do reakcie (systému).**

$$n_{i,\text{vstup}} > n_{i,\text{vstup}}^T$$

$$m_{i,\text{vstup}} > m_{i,\text{vstup}}^T$$

Teoretické množstvo vodíka sa vypočíta z úpravy vzťahu na výpočet teoretického rozsahu (rýchlosti) reakcie.

$$\xi^T = \frac{-\alpha_D^T \cdot (n_{2D})^T}{\nu_D} = \frac{-\alpha_D^T \cdot (m_{2D})^T}{M_D} \Rightarrow m_{2D}^T$$

$$\begin{aligned} M_D &= 2 \text{ kg/kmol} \\ \nu_D &= -1 \\ \alpha_D^T &= 1 \end{aligned}$$

$$m_{2D}^T = 7.59726 \text{ kg/h}$$

Výpočet skutočne privedeného množstva vodíka:

"Búrenie rozumčekov".....

25 percentný nadbytok reaktanta sa rovná koeficientu nadbytku 1,25. Z tohto logicky vyplýva, že 300 percentný nadbytok reaktanta je rovný koeficientu nadbytku 4.....

$$m_2 = 4 \cdot m_{2D}^T = 30.389 \text{ kg/h}$$

Dosadiac doposiaľ známe a vypočítané hodnoty do materiálovej bilancie.....

Materiálová bilancia reaktora:

Prúdy Zložky	1	2	r	3	
A: C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	$m_1 \cdot w_{1A}$ 150.0024		$1 \cdot \xi \cdot M_A$ 207.6976	$m_3 \cdot w_{3A}$ 357.7	$w_{3A} = 0.34715$
B: C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> CH <sub>3</sub>	$m_1 \cdot w_{1B}$ 350.0056		$(-1) \cdot \xi \cdot M_B$ -245.004	$m_3 \cdot w_{3B}$ 105.0017	$w_{3B} = 0.1019$
C: n-alk.	$m_1 \cdot w_{1C}$ 500.008			$m_3 \cdot w_{3C}$ 500.008	$w_{3C} = 0.48525$
D: H <sub>2</sub>		$m_2 \cdot w_{2D}$ 30.38903	$(-1) \cdot \xi \cdot M_D$ -5.31808	$m_3 \cdot w_{3D}$ 25.07095	$w_{3D} = 0.02433$
E: CH <sub>4</sub>			$1 \cdot \xi \cdot M_E$ 42.54464	$m_3 \cdot w_{3E}$ 42.54464	$w_{3E} = 0.04129$
$\Sigma$	$m_1$ 1000.02	$m_2$ 30.389	$m_r$ 0	$m_3$ 1030.41	0.999923

1030.325

Stupeň premeny vodíka:

$$\alpha_D = (m_{2D} - m_{3D}) / m_{2D} = 0.175$$

Mólový zlomok benzénu v plynných produktoch:

$$x_{3A} = \frac{\frac{w_{3A}}{M_A}}{\frac{w_{3A}}{M_A} + \frac{w_{3B}}{M_B} + \frac{w_{3C}}{M_C} + \frac{w_{3D}}{M_D} + \frac{w_{3E}}{M_E}} = 0.16322$$