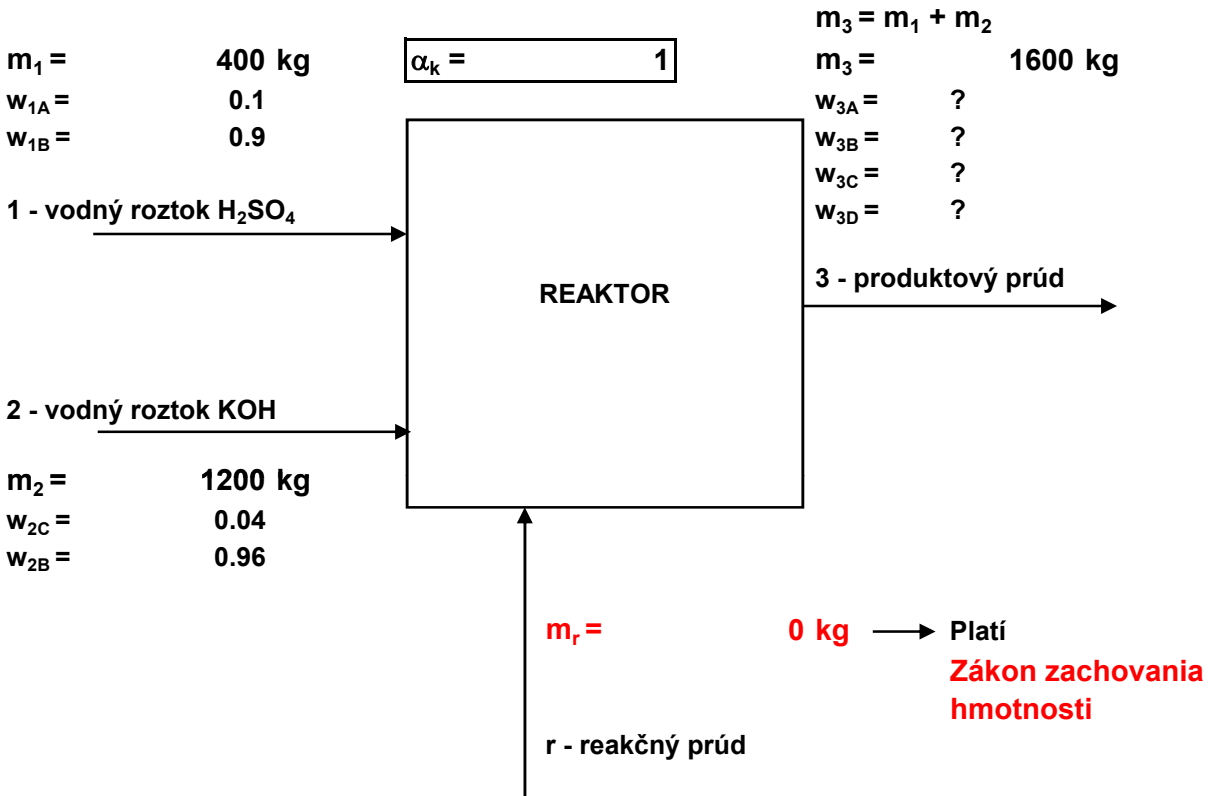


MB - R - Příklad 2

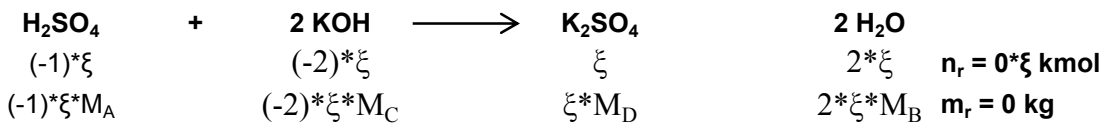
V zariadení prebieha proces neutralizácie. Mieša sa 400 kg vodného roztoku kyseliny sírovej, s koncentráciou 10 % hm., s 1200 kg vodného roztoku KOH o koncentrácii 4 hm. %. Predpokladajte, že stupeň premeny limitujúcej zložky je rovný jednej. Vypočítajte stupeň premeny neklúčovej zložky, jej koeficient nadbytku a zloženie produktového prúdu.

Bilančná schéma:



Zložky:

- A- H_2SO_4
- B- H_2O
- C-KOH
- D- K_2SO_4



Materiálová bilancia:

Prúdy Zložky	1	2	r	3
A: H ₂ SO ₄	m ₁ *w _{1A} 40	-	(-1)*ξ*M _A ?	m ₃ *w _{3A} ?
B: H ₂ O	m ₁ *w _{1B} 360	m ₂ *w _{2B} 1152	2*ξ*M _B ?	m ₃ *w _{3B} ?
C: KOH	-	m ₂ *w _{2C} 48	(-2)*ξ*M _C ?	m ₃ *w _{3C} ?
D: K ₂ SO ₄	-		1*ξ*M _D ?	m ₃ *w _{3D} ?
Σ	m₁ 400	m₂ 1200	m_r 0	m₃ 1600

$$\xi = -\frac{\alpha_A \cdot \frac{n_{1A}}{M_A}}{v_A} \quad \wedge \quad \xi^T = -\frac{\alpha_A^T \cdot \frac{n_{1A}^T}{M_A}}{v_A}$$

$$\xi = -\frac{\alpha_C \cdot \frac{n_{1C}}{M_C}}{v_C} \quad \wedge \quad \xi^T = -\frac{\alpha_C^T \cdot \frac{n_{1C}^T}{M_C}}{v_C}$$

$$\alpha_A^T = \alpha_C^T = 1$$

Stupeň premeny limitujúcej (kľúčovej) zložky (reaktanta) je rovný podľa zadania jednej.....

Tato informácia naznačuje, že bude nutné si najprv zistiť limitujúci reaktant a jemu priradený stupeň premeny ($\alpha_k = 1$).

Študenti, s pravdepodobnosťou hraničiacou s istotou ste si všimli, že materiálovú bilanciu budeme počítat' v jednotkách hmotnosti. A prečo nie? Ponúkané údaje zo zadania nás tam priam logicky "dotláčajú".....

V zdrojových (reakčných) členoch nám budú teraz zanikať resp. vznikať "kilogramíky" reaktantov a produktov, a preto je nutné, aby boli ich látkové množstvá v zdrojových členoch prenasobené príslušnou mólovou hmotnosťou.

Mólové hmotnosti zložiek:

M _A =	98.08 kg/kmol
M _B =	18 kg/kmol
M _C =	56.108 kg/kmol
M _D =	174.26 kg/kmol

Konverzia reakcie je 100 % - ná.



Stupeň premeny limitujúcej zložky je
1

$$\alpha_k = 1$$

Do reaktora vstupujú 40 kg kyseliny sírovej a 48 kg hydroxidu draselného. Konverzia reakcie je 100 % - ná.

V prípade, že je zadaná konverzia reakcie (v %) a nie stupeň premeny konkrétneho reaktanta, je konverzia vzťahovaná na kľúčovú zložku (k), ktorá má byť vždy limitujúcim reaktantom.

Určenie limitujúceho (kľúčového) reaktanta:

Výpočet charakteristických hodnôt, pri ktorých by oba reaktanty úplne zreagovali.

$$-\frac{n_{1A}}{v_A} = -\frac{\frac{m_{1A}}{M_A}}{v_A} =$$

$$-\frac{n_{2C}}{v_C} = -\frac{\frac{m_{2C}}{M_C}}{v_C} =$$

0.40783 kmol

0.42775 kmol

Ten s nižšou hodnotou je limitujúci reaktant.

Limitujúcim reaktantom je kyselina sírová.

$$\alpha_A = \alpha_k = 1$$

$$\alpha_C < \alpha_A$$

Výpočet rozsahu reakcie:

Rozsah reakcie si vypočítame z prepočtového vzťahu medzi rozsahom reakcie a už známeho stupňa premeny kyseliny sírovej.

$$\xi = -\frac{\alpha_A \cdot n_{1A}}{V_A} = -\frac{\alpha_A \cdot \frac{m_{1A}}{M_A}}{V_A} = \mathbf{0.40783 \text{ kmol}}$$

Výpočet teoretického rozsahu reakcie:

Teoretický rozsah reakcie si vypočítame pomocou **limitujúcej zložky**. Je tým rozsahom reakcie, kedy limitujúca zložka zreaguje úplne ($\alpha_k = 1$). Je teda maximálne možným rozsahom reakcie.

$$\xi^T = \frac{n_{k,výstup} - n_{k,vstup}}{V_k} = \frac{0 - n_{k,vstup}}{V_k} = \frac{-n_{k,vstup}}{V_k} \Rightarrow \xi^T = \frac{-\alpha_k \cdot n_{k,vstup}}{V_k}$$

V našom prípade je jeden limitujúce reaktant - kyselina sírová.

$$\xi^T = \frac{-\alpha_A^T \cdot n_{1A}^T}{V_A} = \frac{-\alpha_A^T \cdot \frac{m_{1A}^T}{M_A}}{V_A} = \mathbf{0.40783 \text{ kmol}}$$

Množstvo limitujúceho (kľúčového) reaktanta ($n_{k, vstup}$) je zároveň teoretickým množstvom reaktanta (n_i^T). Platí to aj prirodzene aj keby sme počítali v jednotkách hmotnosti....

$$m_{1A} = m_{1A}^T = \mathbf{40 \text{ kg}}$$

Reakčný člen m_r :

$$m_r = \mathbf{0 \text{ kg}} \quad \text{Platí Zákon zachovania hmotnosti !!!!!}$$

Zdrojové (reakčné) členy reaktantov a produktov v materiálovej bilancii:

$$m_{rA} = -1 \cdot \xi \cdot M_A = \mathbf{-40 \text{ kg}}$$

$$m_{rB} = 2 \cdot \xi \cdot M_B = \mathbf{14.6819 \text{ kg}}$$

$$m_{rC} = -1 \cdot \xi \cdot M_C = \mathbf{-45.7651 \text{ kg}}$$

$$m_{rD} = 1 \cdot \xi \cdot M_D = \mathbf{71.0685 \text{ kg}}$$

Dosadenie už znamých hodnôt do materiálovej bilancie a dopočet množstva a zloženia vystupujúceho prúdu:

Materiálová bilancia:

Prúdy Zložky	1	2	r	3
A: H ₂ SO ₄	$m_1 \cdot w_{1A}$ 40	-	$(-1) \cdot \xi \cdot M_A$ -40	- 0
B: H ₂ O	$m_1 \cdot w_{1B}$ 360	$m_2 \cdot w_{2B}$ 1152	$2 \cdot \xi \cdot M_B$ 14.68189	$m_3 \cdot w_{3B}$ 1526.682
C: KOH	- -	$m_2 \cdot w_{2C}$ 48	$(-2) \cdot \xi \cdot M_C$ -45.7651	$m_3 \cdot w_{3C}$ 2.23491
D: K ₂ SO ₄	-		$1 \cdot \xi \cdot M_D$ 71.06852	$m_3 \cdot w_{3D}$ 71.06852
Σ	m_1 400	m_2 1200	m_r 0	m_3 1600

Zloženie vystupujúceho prúdu:

$$w_{3A} = 0$$

$$w_{3B} = 0.95418$$

$$w_{3C} = 0.0014$$

$$w_{3D} = 0.04442$$

1600

Stupeň premeny KOH:

Úpravou prepočtovho vzťahu medzi rozsahom reakcie a stupňom premeny vodíka,

$$\xi = -\frac{\alpha_C \cdot \frac{m_{2C}}{M_C}}{v_C} \Rightarrow \alpha_C = \frac{-\xi \cdot v_C \cdot M_C}{m_{2C}} = 0.95344$$

alebo z definičného vzťahu:

$$\alpha_C = \frac{m_{2C} - m_{3C}}{m_{2C}} = 0.95344$$

Teoretické množstvá reaktantov a ich koeficienty nadbytkov.

Teoretické množstvo reaktanta je také množstvo reaktanta, kedy by limitujúci reaktant (limitujúca zložka) skonvertovala na 100 % (stupeň premeny sa rovná jednej).

Teoretické množstvá reaktantov (H₂SO₄ a KOH) sa vypočíta z úpravy vzťahu na výpočet teoretického rozsahu reakcie.

$$m_{1A}^T = -\xi^T \cdot v_A \cdot M_A = 40 \text{ kg}$$

$$m_{2C}^T = -\xi^T \cdot v_C \cdot M_C = 45.7651 \text{ kg}$$

Koeficient nadbytku reaktanta je definovaný ako podiel skutočného množstva reaktanta vstupujúceho do reakcie (systému) k teoretickému množstvu reaktanta.

$$kn_i = \frac{m_{i,vstup}}{m_i^T}$$

Ak je reaktant limitujúcou (kľúčovou) zložkou, sú obe množstvá rovnaké a koeficient nadbytku reaktanta je rovný jednej (bez ohľadu na to, aký je jeho stupeň premeny). Koeficient nadbytku neklúčovej zložky je vždy väčší ako jedna.

$$kn_A = \frac{m_{1A}}{m_A^T} = 1$$

$$kn_C = \frac{m_{2C}}{m_C^T} = 1.04883$$