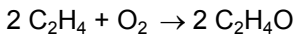


MB - R - Příklad 3

Etylénoxid sa vyrába oxidáciou etylénu, v prítomnosti strieborného katalyzátora, podľa reakcie



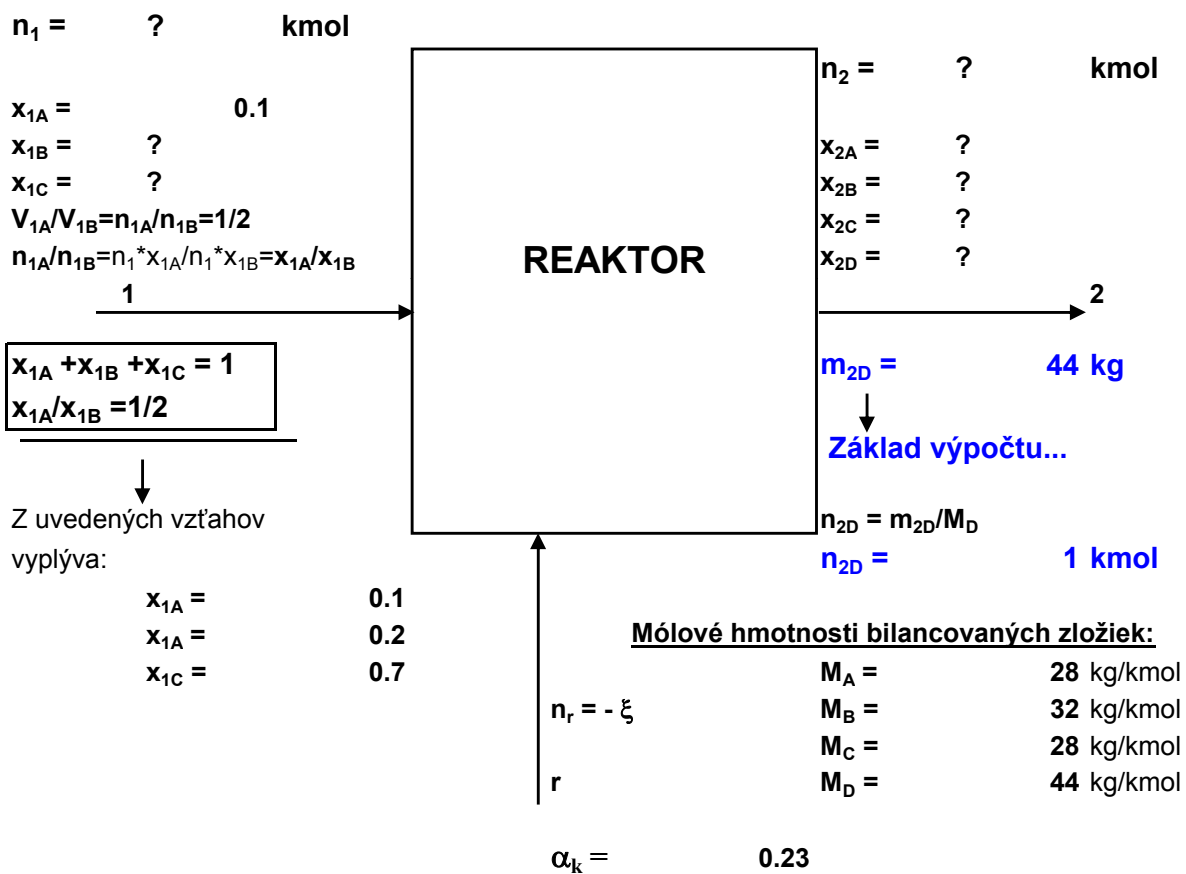
Do reaktora vstupuje plynná zmes obsahujúca etylén, kyslík and dusík. Objemový pomer etylénu ku kyslíku je 1:2 a mólový zlomok etylénu v plynnnej zmesi je 0.1. Konverzia reakcie je 23 % -ná a v reaktore sa vyrobí 44 kg etylénoxidu.

Vypočítajte:

1. Zloženie vstupujúceho a vystupujúceho prúdu v mólových zlomkoch.

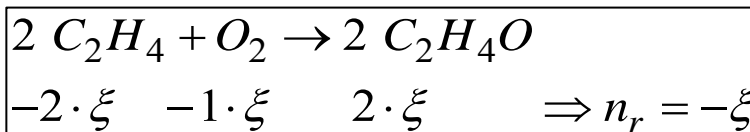
2. Stupne premeny a koeficienty nadbytkov oboch reaktantov.

Bilančná schéma:



Prúdy: 1 - vstupujúca plynná zmes
 2 - vystupujúca plynná zmes
 r - reakčný prúd

Zložky: A - etylén (C_2H_4)
 B - kyslík (O_2)
 C - dusík (N_2)
 D - etylénoxid ($\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$)



Materiálová bilancia:

Prúdy Zložky	1	r	2
A: C ₂ H ₄	n ₁ *0.1	(-2)*ξ	n ₂ *x _{2A}
B: O ₂	n ₁ *0.2	(-1)*ξ	n ₂ *x _{3B}
C: N ₂	n ₁ *0.7		n ₂ *x _{2C}
D: C ₂ H ₄ O		2*ξ	n ₂ *x _{2D} 1
Σ	n ₁	n _r	n ₂

Napíšte si aj prepočtové vzťahy medzi rozsahom reakcie a stupňom premeny reaktanta a teoretickým rozsahom reakcie a teoretickým množstvom reaktanta.

Dusík je inertná zložka, ktorá sa nezúčastňuje reakcie. V akom množstve do reaktora vstúpi, v tom istom množstve aj vystúpi.

1. krok výpočtu:

Výpočet rozsahu reakcie z bilancie etylénoxidu:

$$2 \cdot \xi = n_2 \cdot x_{2D} = n_{2D} \Rightarrow \xi = 0.5 \text{ kmol}$$

2. krok výpočtu:

Dopočet zdrojových členov produktov a reaktantov a reakčného člena n_r:

Reakčný člen n_r:

$$n_r = -1 \cdot \xi = -0.5 \text{ kmol}$$

Zdrojové členy:

$$n_{rA} = -2 \cdot \xi = -1 \text{ kmol}$$

$$n_{rB} = -1 \cdot \xi = -0.5 \text{ kmol}$$

$$n_{rD} = 2 \cdot \xi = 1 \text{ kmol}$$

Studenti, pekne ste sa rozbehli a vytešujete sa, že ste nezapadli ako volský povoz do močiarnej mazľavej bačoriny.....
Už len pár myšlienových erupcií slovne pretavených na textúru papiera a šumivé vínečko zavlaží vaše hrdielka v oslavnej "etylénoxidovej" eufórii.
Ako špekulujete tak špekulujete nad ďalším postupom, materiálová bilancia veru už odmieta vydať ďalšie svoje žiarlivo strážené intímne tajomstvá.....
Tápate v jej bludisku, postupne nadobúdnutá sebadôvera víťaza kľčovito balancuje nad prepadliskom beznádeje....

Zrazu si niekto z vás spomenú na "vnútorný šepot" vlastného podvedomia:

Napiš si automaticky vedľa bilancie reaktanta zároveň aj prepočtové vzťahy medzi rozsahom reakcie a stupňom jeho premeny, a teoretickým rozsahom reakcie a teoretickým množstvom reaktanta (vtedy je ich stupeň premeny rovný samozrejme jednej). Nemusia byť potrebné avšak môžu Ti veru aj kožušok zachrániť

$$\xi = -\frac{\alpha_i \cdot n_{i,vstup}}{V_i} \quad \wedge \quad \xi^T = -\frac{\alpha_i^T \cdot n_{i,vstup}^T}{V_i}$$

Pri už známom rozsahu reakcie si musíme zistiť limitujúci reaktant a priradiť mu stupeň premeny definovaný zo zadania známou konverziou reakcie.

Potom nám už nič nezabráni dopočítať z prepočtového vzťahu medzi rozsahom reakcie a stupňom premeny limitujúceho reaktanta jeho množstvo na vstupe (n_{i1}).

A tento údaj spontánne rozbehne ďalšie kroky výpočtu až do úspešného zavŕšenia priam rýchlosťou uponáhľaných fotónov "zrýchlených" hnačkovou infekciou.....

Zistenie limitujúceho reaktanta:

Keďže nepoznáme látkové množstvá reaktantov vstupujúce do systému, pomôžeme si ich známym pomerom látkových množstiev na vstupe do reaktora.

Na zistenie limitujúceho reaktanta si môžeme zvoliť ľubovoľné vstupujúce látkové množstvo napr. etylénu a látkové množstvo vstupujúceho kyslíka si dopočítam z ich známeho pomeru.

Tieto množstvá sú len pomocné (nie skutočné) a slúžia len na určenie limitujúceho reaktanta.

Každý reaktant má svoju charakteristickú hodnotu

$$-\frac{n_{i,vstup}}{V_i}$$

pri ktorej by sa úplne spotreboval. Reaktant s najmenšou charakteristickou hodnotou je limitujúcim reaktantom.

Výpočtom charakteristických hodnôt reaktantov sa dopracujeme k limitujúcemu reaktantu.

Ak vstupuje do zariadenia etylén s kyslíkom v pomere 1:2 môžeme si zvoliť za základ zistenia limitujúceho reaktantu napr. 10 mólov etylénu. Kyslíku je potom 20 mólov.

$$\left. \begin{array}{l} -\frac{n_{C_2H_4}}{V_{C_2H_4}} = -\frac{10}{(-2)} = 5 \text{ mol} \\ -\frac{n_{O_2}}{V_{O_2}} = -\frac{20}{(-1)} = 20 \text{ mol} \end{array} \right\} \text{Limitujúcim reaktantom je etylén.}$$

↓

$$\alpha_A = \alpha_K = 0.23$$

$$\alpha_B < 0.23$$

Výpočet látkového množstva vstupujúceho etylénu:

Úpravou vzťahu medzi rozsahom reakcie a stupňom premeny aplikovaného na etylén vypočítame jeho látkové množstvo na vstupe.

$$\xi = \frac{-\alpha_A \cdot n_{1A}}{V_A} \Rightarrow n_{1A} = \frac{\xi \cdot V_A}{-\alpha_A} = \frac{0.5 \cdot (-2)}{-0.23} = 4.34783 \text{ kmol}$$

Výpočet látkového množstva vstupujúcej plynnej zmesi:

$$n_1 = \frac{n_{1A}}{x_{1A}} = 43.4783 \text{ kmol}$$

Výpočet teoretického rozsahu reakcie:

$$\xi^T = \frac{-n_{1A}^T}{V_A} = \frac{-n_{1A}}{V_A} = 2.17391 \text{ kmol}$$

Výpočet látkových množstiev kyslíka a dusíka vo vstupujúcej plynnej zmesi:

$$n_{1B} = n_1 \cdot x_{1B} = 8.69565 \text{ kmol}$$

$$n_{1C} = n_1 \cdot x_{1C} = 30.4348 \text{ kmol}$$

Výpočet látkového množstva vystupujúcej plynnej zmesi:

$$n_2 = n_1 + n_r = 42.9783 \text{ kmol}$$

"Zvyšok neznámych" dopočítame doplnením práve nadobudnutých informácií do materiálovej bilancie.....

Materiálová bilancia:

Prúdy Zložky	1	r	2
A: C ₂ H ₄	n ₁ *0.1 4.347826	(-2)*ξ -1	n ₂ *x _{2A} 3.347826
B: O ₂	n ₁ *0.2 8.695652	(-1)*ξ -0.5	n ₂ *x _{2B} 8.195652
C: N ₂	n ₁ *0.7 30.43478		n ₂ *x _{2C} 30.43478
D: C ₂ H ₄ O		2*ξ 1	n ₂ *x _{2D} 1
Σ	n ₁ 43.4783	n _r -0.5	n ₂ 42.9783

Zloženie vystupujúceho prúdu:

$$x_{2A} = 0.0779$$

$$x_{2B} = 0.19069$$

$$x_{2C} = 0.70814$$

$$x_{2D} = 0.02327$$

Stupeň premeny kyslíka

$$\alpha_B = \frac{n_{1B} - n_{2B}}{n_{2B}} = 0.0575$$

Teoretické množstvá reaktantov a ich koeficienty nadbytkov

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

Teoretické množstvá reaktantov (dusíka a vodíka) si vypočítame z úpravy vzťahu na výpočet teoretického rozsahu reakcie.

$$n_{1A}^T = -\xi^T \cdot \nu_A = 4.34783 \text{ kmol}$$

$$n_{2B}^T = -\xi^T \cdot \nu_B = 2.17391 \text{ kmol}$$

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

$$kn_i = \frac{n_{i,vstup}}{n_i^T}$$

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.

$$kn_A = \frac{n_{1A}}{n_A^T} = \frac{n_{1A}}{n_A^T} = 1$$

$$kn_B = \frac{n_{2B}}{n_B^T} = \frac{n_{2B}}{n_B^T} = 4$$

Mravné ponaučenie:

Na výstupe z bilančného systému sa **môžu teoreticky** nachádzať všetky zložky, ktoré do neho vstupujú alebo sú produktami chemického procesu. **Či aj prakticky**, vyplynie zo zadania a výpočtového procesu.