

Tentamen i Kemisk reaktionsteknik för Kf3, K3 (KKR 100)

Onsdagen den 17 december 2011 kl 8:30-13:30 i Hörsalarna

Examinator: Bitr. Prof. Louise Olsson

Louise Olsson (031-772 4390) kommer att besöka tentamenslokalen på förmiddagen.

Tillåtna hjälpmedel

Valfri räknare
Formelsamlingar utgiven av institutionen
TEFYMA
Standard Mathematics Handbook
beta Mathematics Handbook
Physics Handbook
Handbook of Chemistry and Physics

Ej tillåtna hjälpmedel

Kursbok, "Chemical Reactions and Chemical Reactors"
Kompendium i KRT
KRT övningsbok
Lösta exempel

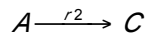
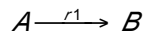
Betygskala:

Poäng	Betyg
15-19.5	3
20-24.5	4
25-30	5



Uppgift 1 (6 poäng)

Följande reaktioner sker i vätskefas:



Reaktionen är första ordningen med avseende på den reagerande komponenten. Reaktionen sker i en tubreaktor med recirkulation. Vad blir omsättningsgraden av A?

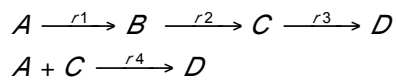
Data:

Hastighetskonstant, k_1	0.8 s^{-1}
Hastighetskonstant, k_2	0.6 s^{-1}
Flöde in till hela systemet	$0.4 \text{ m}^3/\text{s}$
Koncentration av A i inflödet	$500 \text{ mol}/\text{m}^3$
Andel av flödet ut från reaktorn som recirkuleras	20%
Tubvolym	0.6 m^3



Uppgift 2 (6 poäng)

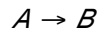
Vätskefasreaktionerna



sker i en tubreaktor och är första ordningen mot respektive reaktant. Reaktionerna sker på sfäriska katalysatorpartiklar. **Det yttre mass-transportmotståndet** är viktigt, medan det inre kan försummas. Sätt upp de ekvationer som behövs för att beräkna hur koncentrationen av A, B, C och D varierar **mot på tid och längd**. Inga ekvationer behöver lösas, men lösningsgången skall beskrivas i detalj och alla införda beteckningar skall namnges.

Uppgift 3 (6 poäng)

En tubreaktor används för vätskefasreaktionen



Tyvärr är reaktorn kraftigt oideal. Kanalbildning har skett. 20% av tvärsnittsarean på reaktorn utgörs av kanalen och man kan anta att kanalen har samma diameter genom hela reaktorn. I denna kanal går 45% av flödet. Vidare finns en dödvolum på 10% som ej används för reaktionen. Vilken är omsättningsgraden i denna oideal reaktor?

Diametern på reaktor är 15 cm och längden 0.9m. Koncentrationen av A inflödet är 300 mol/m³ och flödet in till reaktorn är 0.012 m³/s och hastighetskonstanten 0.9 s⁻¹.

Uppgift 4 (6 poäng)

En reversibel endoterm reaktion $A \leftrightarrow B$ sker i en serie av 3 tankar med mellanligande värmning. Pga risk för katalysatordeaktivering i kombination med värmekostnader kan reaktorn ej värmas till högre temperatur än 450°C . Flödet in till den första reaktorn värms till 450°C . Inflödet består av 25% A och 75% inert material. Inflödet av ämne A är 0.5 mol/s .

Värmekapaciteten för ämne A: 75 J/(mol K)

Värmekapaciteten för ämne B: 87 J/(mol K)

Värmekapaciteten för ämne I: 79 J/(mol K)

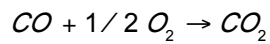
Reaktionsvärmnet är $\Delta H = 140 \text{ kJ/mol}$

C_p och ΔH kan antas konstant i det givna temperaturintervallet.

Vad blir omsättningsgraden ut från anläggningen ifall man optimerar värmningen med fokus på hög omsättningsgrad? Den lägsta temperaturen för att köra reaktorn med tillräckligt god reaktionshastighet är 325°C .

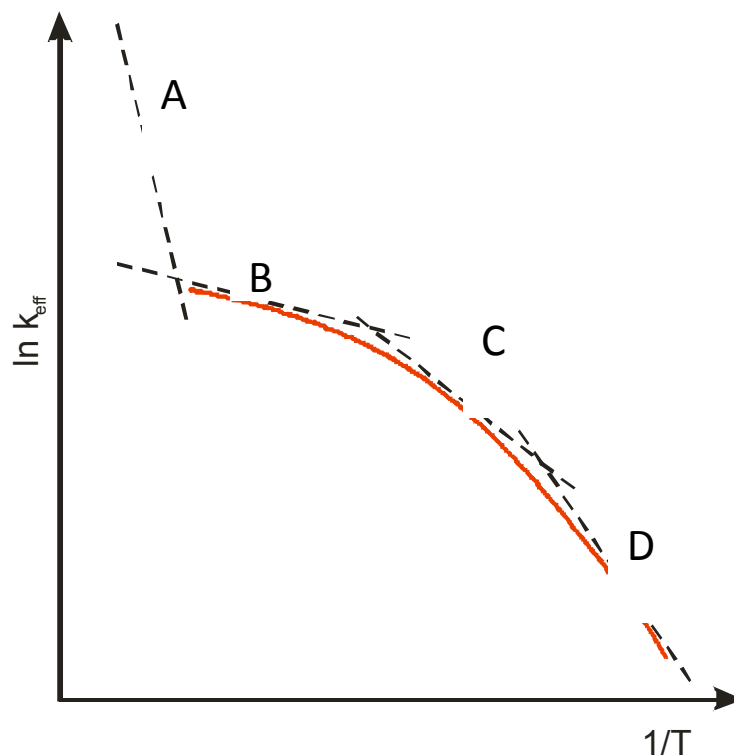
Uppgift 5 (6 poäng)

a) CO oxideras av O_2 och bildar CO_2 enligt reaktionen:



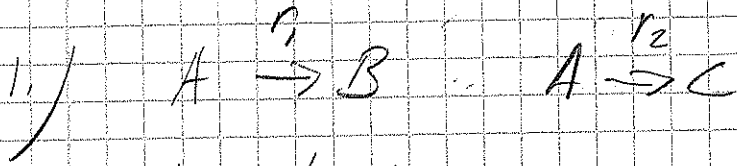
Denna reaktion sker på en platinayta i en katalysator. Beskriv alla steg (transportsteg och reaktionssteg) för att få CO_2 ute i gasfasen från CO och O_2 i gasfasen. Reaktionen sker endast på platinaytan.

b) Om man utför experiment vid olika temperaturer kan man titta på logaritmen av hastighetskonstanten mot $1/T$ och då få nedanstående resultat. Det finns 4 olika regimer markerade med A, B, C och D. Beskriv vad som är dominerande i dessa regimer.



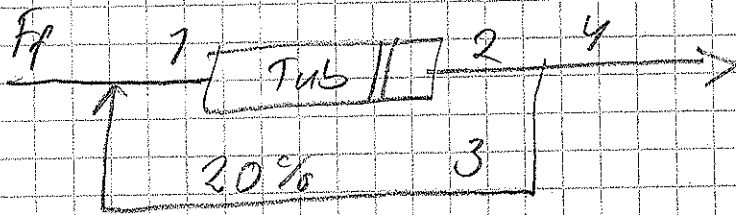
c) Om bara ytreaktionen dominerar, beskriv hur du bestämmer pre-exponentiell faktor och aktiveringsenergi. Anv. diagrammet ovan om du vill.

Tenta KKR 100, 2011-12-17 ①



$$r_1 = k_1 C_A$$

Solub. Omsättning av
A, X_A .



Blandningspunkt: $F_{A1} + 0,2 \cdot F_{A2} = F_{A1}$

$$F_A - (F_A + dF_A) - k_1 \cdot C_A \cdot dV - k_2 C_A dV = 0$$

$$-dF_A = (k_1 + k_2) C_A dV \quad \frac{1}{s} \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \cdot \text{m}^3$$

$$F_A = q_1 \cdot C_A \quad C_A = \frac{F_A}{q_1}$$

$$-dF_A = \frac{(k_1 + k_2) F_A}{q_1} dV$$

$$\int_{F_{A1}}^{F_{A2}} \frac{-dF_A}{F_A} = \frac{(k_1 + k_2) \cdot V}{q_1}$$

$$\left[-\ln F_A \right]_{F_{A1}}^{F_{A2}} = \frac{(k_1 + k_2) \cdot V}{q_1}$$

$$\ln \frac{F_{A1}}{F_{A2}} = \frac{(k_1 + k_2) \cdot V}{q_1} \quad \frac{F_{A1}}{F_{A2}} = \exp\left(\frac{(k_1 + k_2) \cdot V}{q_1}\right)$$

$$F_{FA} + 0,2 F_{A2} = F_{A2} \cdot \exp\left(\frac{(k_1 + k_{-2}) \cdot V}{q_1}\right) \quad (2)$$

$$F_{A2} \left(\exp\left(\frac{(k_1 + k_{-2}) \cdot V}{q_1}\right) - 0,2 \right) = F_{FA}$$

$$q_3 + q_f = q_1, \quad q_1 = q_2, \quad q_3 = 0,2 q_2$$

$$q_1 = 0,2 q_2 + q_f = 0,2 q_1 + q_f$$

$$0,8 q_1 = q_f$$

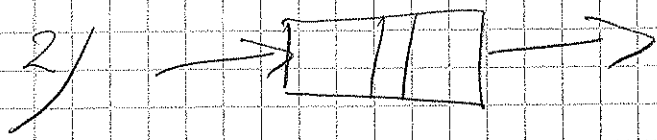
$$q_1 = \frac{q_f}{0,8}$$

$$\Rightarrow q_1 = 0,5 \text{ m}^3/\text{s}$$

$$F_{A2} = 38,72 \text{ mol/s}$$

$$F_{A4} = 0,8 \cdot F_{A2} = 30,97 \text{ mol/s}$$

$$\lambda = 1 - \frac{F_{A4}}{F_{AF}} = \underline{\underline{0,85}}$$



3

$$F_A - (F_A + dF_A) - k_1 C_A dV - k_4 C_A \cdot C_C dV = \frac{dC_A dV}{dt}$$

$$-dF_A - (k_7 C_{AS} + k_4 C_{AS} C_C) dV = \frac{dC_A dV}{dt}$$

$$-\frac{dF_A}{dV} - (k_7 C_{AS} + k_4 C_{AS} C_C) = \frac{dC_A}{dt}$$

$$F_A = q C_A \quad dF_A = q dC_A$$

$$\textcircled{1} - q \frac{dC_A}{dV} - (k_7 C_{AS} + k_4 C_{AS} C_C) = \frac{dC_A}{dt}$$

$$\textcircled{2} - q \frac{dC_B}{dV} + (k_7 C_{AS} - k_2 C_B) = \frac{dC_B}{dt}$$

$$\textcircled{3} - q \frac{dC_C}{dV} + (k_2 C_B - k_3 C_C - k_4 C_{AS} C_C) = \frac{dC_C}{dt}$$

$$\textcircled{4} - q \frac{dC_D}{dV} + (k_3 C_C - k_4 C_{AS} C_C) = \frac{dC_D}{dt}$$

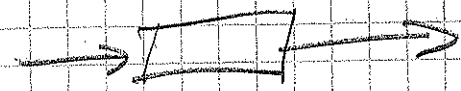
$$\textcircled{5} k_{CA} (C_A - C_{AS}) = k_7 C_{AS} + k_4 C_{AS} C_C$$

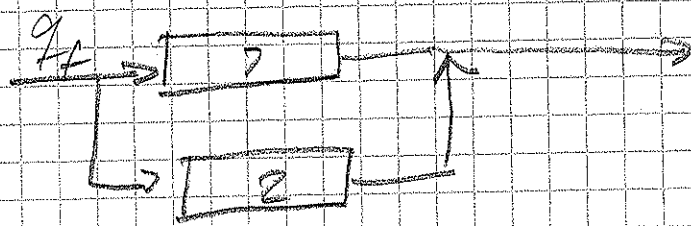
$$\textcircled{6} k_{CB} (C_B - C_{BS}) = k_7 C_{AS} - k_2 C_B$$

$$(7) \quad k_{cc} (L_{cs} - L_{cb}) = k_2 L_{bs} - k_3 L_{cs}$$

$$(8) \quad k_{co} (L_{os} - L_{ob}) = k_3 L_{cc} - k_4 L_{as} L_{cs}$$

Lös (7) - (8) zusammenf.

3.  ideal



$$V_{\text{dot}2} = 0,1 \cdot V_{\text{dot}1}$$

Solut: V_{dot}

$$V_{\text{dot}1, \text{tot}} = 0,9 \cdot V_{\text{dot}}$$

$$V_2 = 0,2 \cdot 0,9 \cdot V_{\text{dot}} = 0,00286 \text{ m}^3$$

$$V_1 = 0,8 \cdot 0,9 \cdot V_{\text{dot}} = 0,01145 \text{ m}^3$$

A \rightarrow B

$$-dF_A - k C_A dV = 0$$

$$-q dC_A - k C_A dV = 0$$

$$-q dC_A = k C_A dV$$

$$-q \int_{C_{AF}}^{C_{A1}} \frac{dC_A}{C_A} = k \int_0^{V_1} dV$$

$$-q_1 \cdot \ln \frac{C_{A1}}{C_{AF}} = k V_1$$

$$\ln \frac{C_{A1}}{C_{AF}} = -\frac{k V_1}{q_1}$$

$$C_{A1} = C_{AF} \cdot \exp\left(-\frac{k V_1}{q_1}\right)$$

$$q_A = q_1 + q_2$$

$$q_2 = 0,45 q_A = 0,0066 \text{ m}^3/\text{s}$$

$$q_1 = 0,55 q_A = 0,0054 \text{ m}^3/\text{s}$$

6

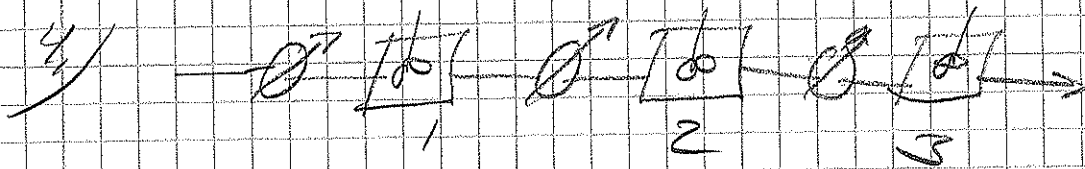
$$C_{A1} = 63,0 \text{ mol/cm}^3$$

$$C_{A2} = C_{A1} \exp\left(-\frac{kV_2}{q_2}\right) = 186,2 \text{ mol/cm}^3$$

$$q \cdot C_{A3} = q_1 \cdot C_{A1} + q_2 \cdot C_{A2} = 1,421$$

$$C_{A3} = \frac{1,421}{q} = 118,4$$

$$X = 1 - \frac{C_{A3}}{C_{A1}} = \underline{\underline{0,61}}$$



(2)

A → B

$$\text{Driftlinie: } \sum F_{2f} \int_{T_{ref}}^{T_2} c_{p,d} dT - \sum F_{1f} \int_{T_{ref}}^{T_1} c_{p,d} dT + F_{AF} \cdot X_{A1} \cdot (-\Delta H) = 0$$

Vgl. $T_{ref} = T_1$

$$\sum F_{2f} c_{p,d} (T_2 - T_1) + F_{AF} \cdot X_{A1} \cdot (-\Delta H) = 0$$

$$X_{A1} = \frac{\sum F_{2f} c_{p,d} (T_2 - T_1)}{-F_{AF} \cdot (-\Delta H)}$$

$$\begin{aligned} 0,25 \cdot F_F &= F_{AF} \\ F_F &= \frac{F_{AF}}{0,25} = 2 \text{ mol/s} \\ F_{AF} &= 0,75 F_F = 1,5 \text{ mol/s} \end{aligned}$$

$T_1 = 325^\circ\text{C}$ $T_2 = 450^\circ\text{C}$

$X_{A1} = 0,279$

$F_{A1} = F_{AF} (1 - X_{A1}) = 0,36 \text{ mol/s}$

$F_{B1} = F_{AF} \cdot X_{A1} = 0,139 \text{ mol/s}$

$$\sum F_{2f} \int_{T_2}^{T_{A2}} c_{p,d} dT + F_{AF} (X_{A2} - X_{A1}) \cdot (-\Delta H) = 0$$

$$X_{A2} - X_{A1} = \frac{\sum F_{2f} c_{p,d} (T_{A2} - T_2)}{-F_{AF} \cdot (-\Delta H)} = 0,282$$

⇒ $X_{A2} = 0,56$

$F_{A2} = F_{AF} (1 - X_{A2}) = 0,22 \text{ mol/s}$

$F_{B2} = F_{AF} \cdot X_{A2} = 0,28 \text{ mol/s}$

$$X_{A3} - X_{A2} = \frac{\sum F_{3A} (P (T_{A3} - T_3))}{-F_{A1} (-\Delta H)} = 0,285$$

(8)

$$X_{A3} = \underline{\underline{0,845}}$$
