



17. GAIA

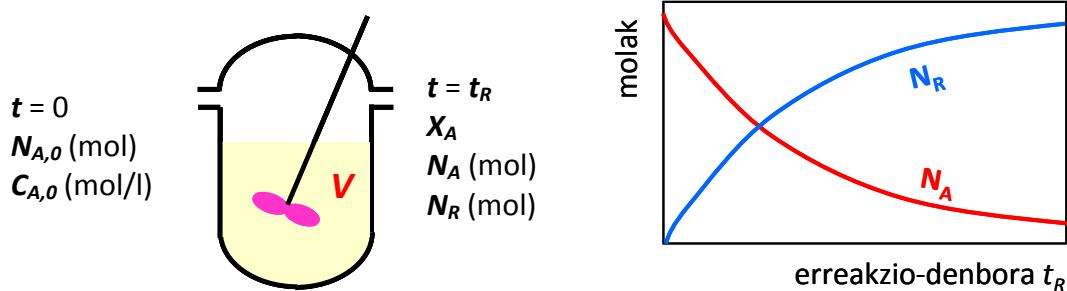
ERREAKTORE EZ-JARRAITU IDEALA

GAI HAU IKASTEAN GAITASUN HAUEK LORTU BEHARKO DITUZU:

1. ε_A kalkulatu.
2. Ekuazio zinetiko homogeneoak erabilten direnean erreaktorearen diseinu-ekuazioa ebatzi.
3. Erreaktore adiabatikoa ebatzi.
4. Ekuazio zinetikoaren lorpenerako metodo integratua erabili.
5. Ekuazio zinetikoaren lorpenerako metodo diferentziala erabili.
6. Gas faseko erreakzioaren jarraipena egin presio osoaren bitartez.
7. Erreakzio-denbora optimoa kalkulatu.

Erreaktore ez-jarraitua laborategian ekuazio zinetikoak lortzeko gehien erabiltzen den erreaktore mota da. Industrian, ekoizpen txikiak egiteko erabiltzen da (industria farmazeutikoan, adibidez), batez ere likido-faseko erreakzioak direnean. Katalizatzaile solidoa esekita behar duten erreakzioak gauzatzeko ere erabiltzen dira.

Erreaktore mota horretan, lehengaiak (erreaktiboak) hasieran sartzen dira erreaktorera, eta denbora batez (erreakzio-denbora) erreakzioa gauzatzen uzten da. Erreakzioa amaitzean, bihurtu gabeko lehengai eta produktuen nahastea irteten da erreaktoretik. Urrats horien guztien batuketa zikloa da; behin eta berriro errepikatzen da, eta zikloen tartean denbora hil bat egoten da (lehengaien karga, hustuketa eta abar egiteko behar den denbora ez-produktiboa). 17.1 irudian ikus daiteke egoera ez-geldikorrean diharduten erreaktoreen diseinua egiteko beharrezkoak diren aldagaiak eta denboran zehar erreaktore barruan erreaktiboek (A) eta produktuek (R) duten bilakaera.



17.1 irudia. Erreaktore ez-jarraitua eta erreakzioak irauten duen denboran erreaktibo (A) eta produktu (R) molen aldaketa.

Horrelako erreaktoreak diseinatzeko orduan, **erreaktore ideala** dela jotzen da, hau da, erreaktorean lortzen den nahastea ideala dela. Horren ondorioz, erreaktoreko bolumen-elementu guztietan baldintza berdinak daude. Hori bete dadin, ezinbestekoa da nahastearen irabiaketa egokia izatea. 17. gaian erreakzioak homogeneoak direla hartuko da, eta beraz, ekuazio zinetikoa 15.10 ekuazioa bezalakoa izango da¹.

17.1 ERREAKTORE EZ-JARRAITU IDEALAREN DISEINUA: MASA- BALANTZEA

Demagun A osagaiarekiko n ordena partzialeko $aA \rightarrow rR$ erreakzio homogeneoa gauzatzen dela, eta ekuazio zinetikoaren adierazpena $(-r_A) = k \cdot C_A^n$ jakina dela (hau da, k eta n ezagutzen dira).

Aren bihurtze-mailaren definizioaren arabera, une batean bihurtu gabeko Aren molak honela kalkulatu dira:

$$N_A = N_{A,0} \cdot (1 - X_A) \quad (17.1)$$

Adierazpen hori deribatzen bada:

$$dN_A = -N_{A,0} \cdot dX_A \quad (17.2)$$

Ekuazio zinetikoa, C_A bihurtze-mailaz ordezkatzen bada, honela idatziko da:

¹ $A + B + \dots \rightarrow$ produktuak erreakzio homogeneoaren ekuazio zinetikoa $(-r_A) = -\frac{dC_A}{dt} = k \cdot C_A^n \cdot C_B^m \dots$ idazten da.

$$(-r_A) = k \cdot C_A^n = k \cdot C_{A,0}^n \cdot (1 - X_A)^n \quad (17.3)$$

Erreaktore barruan nahasteak betetzen duen bolumena konstantea bada (adibidez, likido-faseko erreakzioetan, edo gas-faseko erreakzioetan, mol-aldaketarik ez badago ((r + s + ...) - (a + b + ...)) = $\Delta n = 0$ bada):

$$\frac{N_A}{V} = \frac{N_{A,0} \cdot (1 - X_A)}{V} \quad (17.4)$$

$$C_A = C_{A,0} \cdot (1 - X_A) \quad (17.5)$$

Hau da, edozein unetan Aren kontzentrazioaren eta bihurtze-mailaren arteko erlazioa zuzena da.

Nahasteak betetzen duen bolumena aldakorra izan daiteke, ordea. Adibidez, gas-faseko erreakzioan mol-aldaketa badago ($\Delta n \neq 0$ bada), nahasteak hasieran betetzen duen bolumena (V_0) eta edozein unetan betetzen duena (V) desberdinak izango dira, temperatura eta presio konstantean lan egiten bada.

Bihurtze-mailarekin bolumena linealki aldatzen dela suposatzen bada:

$$V = V_0 \cdot (1 + \varepsilon_A \cdot X_A) \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right) \cdot \left(\frac{P_0}{P}\right) \quad (17.6)$$

ε_A **bolumenaren gehienezko aldaketa-maila** izanik, dimentsiogabea:

$$\varepsilon_A = \frac{N_{osoa}(X_A = 1) - N_{osoa}(X_A = 0)}{N_{osoa}(X_A = 0)} \quad (17.7)$$

$\varepsilon_A < 0$ denean, nahasteko molak gutxituz doa (gas-fasean $\Delta n < 0$ bada).

$\varepsilon_A = 0$ denean, nahasteko molak konstante diraute (likido-fasean eta gas-fasean $\Delta n = 0$ bada).

$\varepsilon_A > 0$ denean, nahasteko molak gehituz doa (gas-fasean $\Delta n > 0$ bada).

Hori guztia kontuan izanik, nahasteak betetzen duen bolumena aldakorra denez, edozein unetako Aren kontzentrazioa hasierako kontzentrazioarekin erlazionatzean, adierazpen hau lortzen da:

$$\frac{N_A}{V} = \frac{N_{A,0} \cdot (1 - X_A)}{V_0 \cdot (1 + \varepsilon_A X_A)} \cdot \left(\frac{T_0}{T}\right) \cdot \left(\frac{P}{P_0}\right) \quad (17.8)$$

$$C_A = \frac{C_{A,0} \cdot (1 - X_A)}{(1 + \varepsilon_A X_A)} \cdot \left(\frac{T_0}{T}\right) \cdot \left(\frac{P}{P_0}\right) \quad (17.9)$$

17.1 adibidea

2A → B erreakzioa gas-fasean gauzatzen da, temperatura eta presio konstantean. Kalkula dezagun ε_A -ren balioa:

- (a) 100 mol A + 0 mol B sartzen badira
 (b) 100 mol A + 20 mol B sartzen badira
 (c) 100 mol A + 20 mol B + 20 mol inerte sartzen badira
 (d) A → 2B erreakzioa izanik, 100 mol A + 0 mol B sartzen badira
 (e) A → 2B erreakzioa izanik, 100 mol A + 20 mol B + 20 mol inerte sartzen badira

Ebazpena

(a)

molak	A	B	Guztira	
$X_A = 0$	100	0	100	$\varepsilon_A = -0,5$
$X_A = 1$	0	50	50	

(b)

molak	A	B	Guztira	
$X_A = 0$	100	20	120	$\varepsilon_A = -0,417$
$X_A = 1$	0	70	70	

(c)

molak	A	B	Inertea	Guztira	
$X_A = 0$	100	20	20	140	$\varepsilon_A = -0,357$
$X_A = 1$	0	70	20	90	

(d)

molak	A	B	Guztira	
$X_A = 0$	100	0	100	$\varepsilon_A = +1$
$X_A = 1$	0	200	200	

(e)

molak	A	B	Inertea	Guztira	
$X_A = 0$	100	20	20	140	$\varepsilon_A = +0,714$
$X_A = 1$	0	220	20	240	

Ikusten den bezala, gas-faseko erreakzioetan inerteak eragina dauka nahastean betetzen duen bolumenean. $\Delta n < 0$ bada, inerteia sartzean bolumena gutxiago txikitzen da; $\Delta n > 0$ balitz, inertearen presentziak bolumena gutxiago handituko luke.

Adibidea

17.2 adibidea

2A → B erreakzioa gas-fasean gauzatzen da temperatura eta presio konstantean. Erreaktore ez-jarraitua $N_{A,0} = 2$ mol eta $N_{B,0} = 1$ molez betetzen da 1 atm eta 298 K-ean. Kalkula ditzagun A osagaiaren % 75ek erreakzionatu duen uneko A eta B-ren kontzentrazioak.

Ebazpena

Gas-faseko nahasteak hasieran betetzen duen bolumena:

$$V_0 = 3 \text{ (mol)} \cdot 0,082 \text{ (atm} \cdot \text{l/K} \cdot \text{mol)} \cdot 298 \text{ (K)} / 1 \text{ (atm)} = 73,3 \text{ l da.}$$

$C_{A,0} = 2,73 \cdot 10^{-2}$ mol/l eta $C_{B,0} = 1,36 \cdot 10^{-2}$ mol/l dira. Hasierako unean $M = C_{B,0}/C_{A,0} = 0,5$ da.

Lehenik eta behin, ε_A kalkulatu da: $\varepsilon_A = -1/3$, alegia.

Beraz, $V = V_0 \left(1 - \frac{1}{3} X_A\right)$ erlazioa betetzen da.

$$\left. \begin{aligned} C_A &= \frac{C_{A,0} \cdot (1 - X_A)}{(1 + \varepsilon_A X_A)} \\ C_B &= \frac{C_{A,0} \left(M + \frac{1}{2} X_A \right)}{(1 + \varepsilon_A X_A)} \end{aligned} \right\} ; \left\{ \begin{aligned} C_A &= \frac{2,73 \cdot 10^{-2} \cdot (1 - 0,75)}{\left(1 - \frac{1}{3} \cdot 0,75\right)} = 9,1 \cdot 10^{-3} \text{ mol/l} \\ C_B &= \frac{2,73 \cdot 10^{-2} \cdot \left(0,5 + \frac{1}{2} \cdot 0,75\right)}{\left(1 - \frac{1}{3} \cdot 0,75\right)} = 3,185 \cdot 10^{-2} \text{ mol/l} \end{aligned} \right.$$

Erreaktore ez-jarraituan A osagai mugatzailearen masa-balantzea egiten bada (mol/t):

– Desagertzen diren A molak = Metatutako A molak (mol/t)

$$-\frac{dN_A}{dt} = (-r_A) \cdot V \quad (17.10)$$

Bihurtze-maila aldagaitzat aukeratzen bada, eta bolumenak jasan dezakeen aldaketa kontuan hartzen bada, erreaktore ez-jarraitu idealaren diseinu-ekuazioa lortzen da:

$$C_{A,0} \cdot \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A) \cdot (1 + \varepsilon_A X_A)} = t_R^3 \quad (17.11)$$

Ohartu gaitezen bolumen-aldaketarik ez badago, $\varepsilon_A = 0$ dela.

Diseinu-ekuazioak hau adierazten du: erreakzioak zenbat denbora iraun behar duen hasierako kondizio batzuekin bihurtze-maila jakin bat lortzeko; erreakzio-denbora, alegia. 17.4 ekuazioko integrala ebazteko, ekuazio zinetikoak jakina izan behar du nahitaez, hau da, konstante zinetikoak eta erreakzio-ordenak ezagunak izan behar dute.

Diseinu-ekuazioa analitikoki edo grafikoki ebaz daiteke. Integrala zuzenean ebaz daitekeenean hobetsiko da ebazpen analitikoak, eta, ezinezkoa denean, ebazpen grafikoa erabiliko da. Grafikoki ebazteko,

$$\frac{C_{A,0}}{(-r_A) \cdot (1 + \varepsilon_A X_A)} \text{ vs } X_A$$

kurba marraztuko da, eta $[0 - X_A]$ tarteko kurbaren azpiko azalerak adierazten du erreakzioak zenbat iraun behar duen. Bolumen-aldaketarik ez balego,

$$\frac{C_{A,0}}{(-r_A)} \text{ vs } X_A$$

kurbarekin lan egin beharko litzateke.

Hemendik aurrerako azalpenak sinplifikatzeko, bolumen-aldaketarik gabeko ($\varepsilon_A = 0$) eta $(-r_A) = k \cdot C_A^n$ erako ekuazio zinetikoa dagokion erreakzioa hartuko da eredutzat. Gainera, A osagaia bihurtu gabe sartuko dela hartuko da ($X_{A,0} = 0$). Hala, hemendik aurrerako azalpenetan, ekuazio zinetiko eta diseinu-ekuazio hauek erabiliko dira.

² Gas-faseko erreakzioan tenperatura eta presioa aldatutako balira, diseinu-ekuazioa hau izango litzateke:

$$C_{A,0} \cdot \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A) \cdot (1 + \varepsilon_A X_A) \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right) \cdot \left(\frac{P_0}{P}\right)} = t_R.$$

$$(-r_A) = k \cdot C_A^n = k \cdot C_{A,0}^n \cdot (1 - X_A)^n \quad (17.12)$$

$$C_{A,0} \cdot \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} = t_R \quad (17.13)$$

Bolumen-aldaketa balego, prozedura berdinari jarraitu beharko litzaioke.

17.2 ERREAKTORE ISOTERMIKOA

Erreakzioak irauten duen denbora-tarte osoan temperatura aldatzen ez bada, konstante zinetikoa ere (k) ez da aldatuko, eta diseinu-ekuazioko integraletik kanpora atera daiteke.

$$\frac{C_{A,0}}{k} \cdot \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{C_{A,0}^n \cdot (1 - X_A)^n} = t_R \quad (17.14)$$

17.2.1 Ebazpen analitikoa

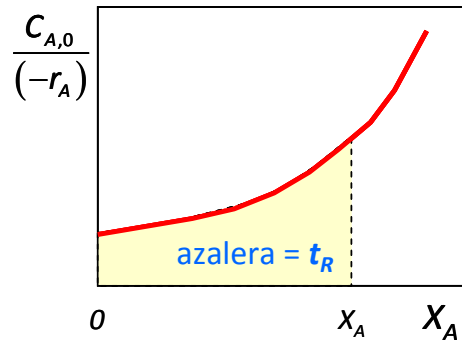
Diseinu-ekuazioan erreakzio-ordena (n) ezaguna bada, integralak ebazpen analitiko sinplea izan dezake, batez ere $n = 0, 1$ edo 2 den kasuetarako. Ondoren agertzen dira ordena horientzat lortzen diren ekuazio integratuak 17.1 taulan:

17.1 Taula. Ohiko ordenetarako masa-balantzearen forma integratua.

Ordena	Adierazpen integratuak
$n = 0$	$t_R = \frac{C_{A,0}}{k} \cdot X_A \quad (17.15)$
	$X_A = k \cdot C_{A,0} \cdot t_R \quad (17.15.a)$
	$C_A = C_{A,0} - k \cdot t_R \quad (17.15.b)$
$n = 1$	$t_R = \frac{1}{k} \cdot \ln \left(\frac{1}{1 - X_A} \right) \quad (17.16)$
	$X_A = 1 - e^{-k \cdot t_R} \quad (17.16.a)$
	$C_A = C_{A,0} \cdot e^{-k \cdot t_R} \quad (17.16.b)$
$n = 2$	$t_R = \frac{1}{k \cdot C_{A,0}} \cdot \left(\frac{X_A}{1 - X_A} \right) \quad (17.17)$
	$X_A = \frac{k \cdot C_{A,0} \cdot t_R}{1 + k \cdot C_{A,0} \cdot t_R} \quad (17.17.a)$
	$C_A = C_{A,0} \cdot \left(1 - \frac{k \cdot C_{A,0} \cdot t_R}{1 + k \cdot C_{A,0} \cdot t_R} \right) \quad (17.17.b)$

17.2.2 Ebazpen grafikoa

Aipatu den bezala, diseinu-ekuazioa grafikoki ebazteko, $\frac{C_{A,0}}{(-r_A)}$ vs X_A kurba marraztu behar da, $X_A = 0$ eta lortu nahi den X_A tartean. Kurbaren azpiko azalera erreakzioa lanean eduki behar den erreakzio-denbora da (t_R). 17.2 irudian agertzen den azalera ilunduak ematen du X_A bihurtze-maila lortzeko erreakzio-denbora.



17.2 irudia. Erreaktore ez-jarraitu isotermoaren diseinu-ekuazioaren ebazpen grafikoa.

Adibidea 17.3 adibidea

Erreaktore isotermo batean $A \rightarrow 2B$ likido-faseko erreakzioa gauzatzen da. Erreakzioaren ekuazio zinetikoa $(-r_A)(\text{mol/l h}) = 2 \cdot C_A$ da. Erreaktorea 2 mol/l A osagaiaz betetzen da. Kalkula ditzagun (a) % 60ko bihurtze-maila lortzeko behar den erreakzio-denbora (b) 0,2 ordu lanean aritzen bada, erreaktoreko nahastearen konposizioa (c) 0,2 ordu lanean jardun ondoren 5 mol B lortu nahi bada, erreaktoreak zer bolumen izan behar duen.

Ebazpen analitikoa

Likido-faseko erreakzioa izanik, ez da bolumen-aldaketarik nabaritu ($\varepsilon_A = 0$). Ekuazio zinetikoa honela idazten da X_A -ren funtzioan:

$$(-r_A)(\text{mol/l h}) = 2 \cdot C_A = 2 \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A)$$

$$(a) \quad t_R = C_{A,0} \int_0^{0,6} \frac{dX_A}{2 C_{A,0} (1 - X_A)} = \frac{1}{2} \cdot \ln\left(\frac{1}{1 - 0,6}\right) = 0,458 \text{ h irau behar du.}$$

(b) 0,2 ordu lanean jardundakoan zer bihurtze-maila lortzen den kalkulatu da:

$$2 \text{ h} = C_{A,0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{2 C_{A,0} (1 - X_A)}$$

$$0,2 \text{ h} = \frac{1}{2} \cdot \ln\left(\frac{1}{1 - X_A}\right) ; \quad X_A = 0,33 \text{ bihurtze-maila lortzen da.}$$

A eta Bren masa-balantzeetatik, amaieran A eta Bren molak lortzen dira:

$$C_A = C_{A,0} \cdot (1 - X_A) = 2 \cdot (1 - 0,33) = 1,34 \text{ mol/l}$$

$$C_B = C_{B,0} + 2 \cdot C_{A,0} \cdot X_A = 0 + 2 \cdot 2 \cdot 0,33 = 1,32 \text{ mol/l}$$

(c) (b) atalean ikusi da, $t_R = 0,2$ h bada, $X_A = 0,33$ dela eta $C_B = 1,32$ mol/l

Beraz, erreaktorean 5 mol B nahi badira, $V = 5 \text{ mol}/1,32 \text{ mol/l} = 3,8 \text{ l}$ bolumeneko erreaktorea behar da.

Adibidea 17.4 adibidea

Erreaktore isoterma batean $A + B \rightarrow 3C$ gas-faseko erreakzioa gauzatzen da. Erreakzioaren ekuazio zinetikoa $(-r_A)(\text{mol/l h}) = 2 \cdot C_A \cdot C_B$ da. Erreaktorea 2 mol/l A eta 2,5 mol/l B osagaiez betetzen da. Kalkula ditzagun (a) Aren % 60 bihurtzeko behar den erreakzio-denbora (b) erreakzioak 0,2 h irauten badu, erreakzioa amaitzean erreaktoreko nahasteak izango duen konposizioa.

Ebazpen grafikoa

Gas-faseko erreakzioa eta $\Delta n \neq 0$ izanik, $\varepsilon_A = +0,444$ da.

A eta Bren masa-balantzeetatik:

$$C_A = \frac{C_{A,0} \cdot (1 - X_A)}{(1 + 0,444 \cdot X_A)} \quad \text{eta}$$

$$C_B = \frac{C_{A,0} \cdot (M - X_A)}{(1 + 0,444 \cdot X_A)}$$

$$M = C_{B,0}/C_{A,0} = 1,25 \quad \text{izanik}$$

Ekuazio zinetikoa honela idazten da X_A -ren funtzioan:

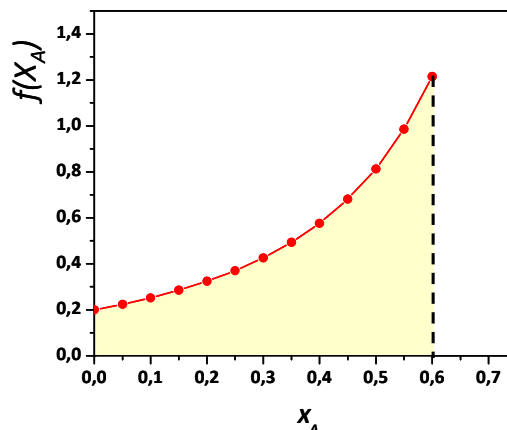
$$(-r_A) = 2 \cdot \frac{C_{A,0}^2 \cdot (1 - X_A) \cdot (1,25 - X_A)}{(1 + 0,444 \cdot X_A)^2}$$

(a) Diseinu-ekuazioan ordezkatzean, adierazpen hau lortzen da:

$$t_R = \int_0^{0,6} \frac{dX_A (1 + 0,444 \cdot X_A)}{2(1 - X_A) \cdot C_{A,0} \cdot (1,25 - X_A)} = \int_0^{0,6} f(X_A) \cdot dX_A$$

Integralaren ebazpen analitikoa bat-batekoa ez denez, grafikoki ebatzi behar da. Ondoko taula eraiki da $f(X_A) = \frac{(1 + 0,444 \cdot X_A)}{2 \cdot (1 - X_A) \cdot C_{A,0} \cdot (1,25 - X_A)}$ hartuta:

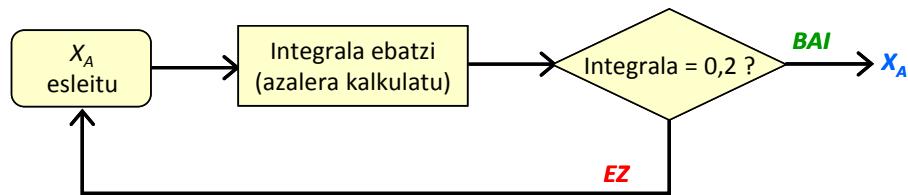
X_A	0	0,05	0,1	0,15	0,2	0,25	0,3	0,35	0,4	0,45	0,5	0,55	0,6
$f(X_A)$	0,2	0,224	0,252	0,285	0,324	0,37	0,426	0,493	0,576	0,681	0,813	0,986	1,215



Erreakzioak iraun behar duen denbora (ilundutako azalera) 0,3 h da.

(b) Ebazpena haztapenez egingo da. Prozedura honi jarraitu behar zaio:

X_A -ri balio bat esleitu \rightarrow azalera kalkulatu \rightarrow 0,2 h-ren berdina den ikusi.



Taula honetan agertzen da X_A -ren kalkularen prozesuaren eboluzioa.

X_A	t_R (h)
0,6	0,3
0,55	0,252
0,5	\approx 0,2

Beraz, 0,2 h-ko erreakzio-denboran, Aren % 50ek erreakzionatuko luke.

Adibidea 17.5 adibidea

Isotermikoki 45 °C-an diharduen erreaktorean $A \rightleftharpoons S$ erreakzio itzulgarria gertatzen da likido-egoeran. Erreaktorea A osagaiak betetzen da, $C_{A,0} = 2$ mol/l kontzentrazioarekin. Kalkula ditzagun (a) Sren 1,25 mol/l kontzentrazioa lortzeko behar den erreakzio-denbora, (b) orekako bihurtze-maila.

Datuak: erreakzioaren ekuazio zinetikoa $(-r_A) \left(\frac{\text{mol}}{\text{l h}} \right) = 5,94 \cdot C_A - 2,26 \cdot C_S = 5,94 \cdot \left[C_A - \frac{C_S}{2,63} \right]$

da.

Ebazpena

$C_A = C_{A,0} \cdot (1 - X_A)$ eta $C_S = C_{A,0} \cdot X_A$ dira, bolumen-aldaketarik ez dagoelako.

Ekuazio zinetikoa ordezkatzeko badira A eta Sren kontzentrazioak, ekuazio zinetiko hau lortzen da: $(-r_A) \left(\frac{\text{mol}}{\text{l h}} \right) = 5,94 \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A) - 2,26 \cdot C_{A,0} \cdot X_A$

Diseinu-ekuazioan ordezkatzuz, eta Sren 1,25 mol/l kontzentrazioa lortzeko, $X_A = 0,625$ behar da:

$$C_S = 2,15 \frac{\text{mol}}{\text{l}} = C_{S,0} + C_{A,0} \cdot X_A = 2 \cdot X_A \frac{\text{mol}}{\text{l}}$$

Diseinu-ekuazioan ordezkatzeko bada:

$$t_R = \frac{C_{A,0}}{5,94 \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A) - 2,26 \cdot C_{A,0} \cdot X_A} \int_0^{0,625} dX_A$$

Analitikoki ebazten bada, $t_R = 0,24$ h erreakzio-denbora lortzen da.

Adibidea 17.6 adibidea

$A \rightarrow 2B$ erreakzio autokatalizatua isotermikoki gauzatzen da 10 l-ko bolumeneko erreaktore ez-jarraituan. Erreaktorea 2 mol A eta 0,3 mol B osagaiak betetzen da. Erreakzioaren ekuazio

zinetikoa hau da: $(-r_A) \left(\frac{\text{mol}}{\text{lmin}} \right) = 0,1 \cdot C_A \cdot C_B$. Kalkula dezagun B osagaiaren 2,5 mol lortzeko erreakzioak zenbat denbora iraun behar duen.

Ebazpena

$C_{A,0} = 0,2 \text{ mol/l}$ eta $C_{B,0} = 0,03 \text{ mol/l}$ dira. $M = C_{B,0}/C_{A,0} = 0,15$ da hasierako unean.

A eta B masa-balantzeetatik:

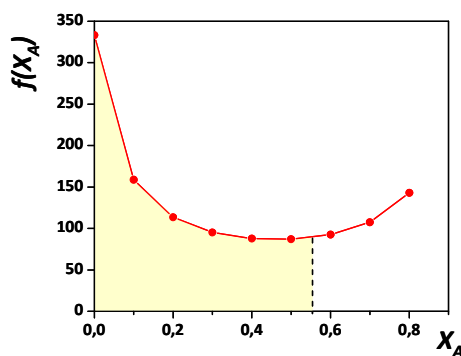
$C_A = 0,2 \cdot (1 - X_A)$ eta $C_B = 0,2 \cdot (0,15 + 2X_A)$ direla lortzen da. Beraz, 2,5 mol B edukitzeko ($C_B = 0,25 \text{ mol/l}$), $X_A = 0,55$ izan behar du.

Balio horiek ekuazio zinetikoan ordezkatzen badira, ekuazio zinetiko hau lortzen da:

$$(-r_A) \left(\frac{\text{mol}}{\text{lmin}} \right) = 0,1 \cdot 0,2 \cdot (1 - X_A) \cdot 0,2 \cdot (0,15 + 2X_A)$$

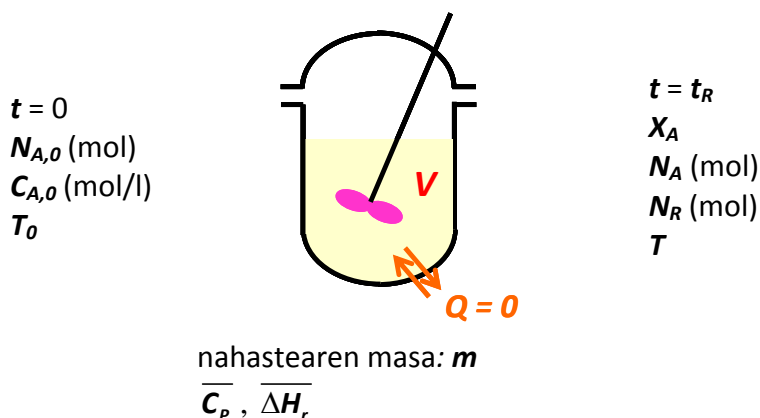
Hori diseinu-ekuazioan ordezkatu eta 0-0,55 tartean integratzen bada, grafikoki, 70,9 minutuko erreakzio-denbora behar dela ikusten da.

X_A	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8
$f(X_A)$	333,3	158,7	113,6	95,2	87,7	87,0	92,6	107,5	142,9



17.3 ERREAKTORE ADIABATIKOA

Erreaktorea ingurunearekiko termikoki isolatuta badago, erreakzioa gertatzen den heinean askatzen den beroa (exotermikoa bada) edo xurgatzen den beroa (endotermikoa bada) jasaten du nahastearen muinak, eta, hala, nahastearen tenperatura aldatu egiten da. Horregatik, diseinu-ekuazioa lortzeko, energia-balantzea ebatzi behar da, nahastearen tenperatura jakin ahal izateko.



17.3 irudia. Erreaktore ez-jarraitu adiabatikoa.

Erreaktore osoan energia-balantzea egiten bada (energia/t):

$$\left(\begin{array}{c} \text{Energiaren} \\ \text{METATZE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenean} \end{array} \right) = \pm \left(\begin{array}{c} \text{Energiaren} \\ \text{SORTZE/XURGATZE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenean} \end{array} \right)$$

Nahastearen bero espezifikoa eta erreakzio-beroaren batez besteko balioak hartzen badira, energia-balantzea honela eman daiteke:

$$(-\overline{\Delta H_r}) \cdot (-r_A) \cdot V = m \cdot \overline{C_p} \cdot \frac{dT}{dt} = (-\overline{\Delta H_r}) \cdot N_{A,0} \cdot \frac{dX_A}{dt} \quad (17.18)$$

Erreakzioaren hasiera ($t = 0$, $X_A = 0$, $T = T_0$) eta amaiera (t_R , X_A , T) artean integratuz, nahastearen tenperaturaren eta bihurtze-mailaren arteko erlazioa kalkula daiteke:

$$T = T_0 + \frac{(-\overline{\Delta H_r}) \cdot N_{A,0} \cdot X_A}{m \cdot \overline{C_p}} \quad (17.19)$$

17.19 adierazpenarekin, bihurtze-maila bat lortu denean nahastearen tenperatura kalkula daiteke. Hortik aurrerako prozedura hau da:

$$X_A \xrightarrow{\text{energia-balantzea}} T \xrightarrow{\text{Arrhenius}} k \xrightarrow{\text{ekuazio zinetikoa}} (-r_A)$$

Diseinu-ekuazioaren ebazpena grafikoa izango da.

Adibidea 17.7 adibidea

1 l-ko bolumeneko erreaktore adiabatikoan $A \rightarrow B$ likido-faseko erreakzioa gauzatzen da, $C_{A,0} = 1$ mol/l izanik eta hasierako tenperatura 25 °C izanik. Erreakzioaren ekuazio zinetikoa ($-r_A$)(mol/l min) = $k \cdot C_A$ da. Kalkula dezagun $X_A = 0,55$ izateko zenbait denbora iraun behar duen erreakzioak.

Datuak: Arrhenius-en ekuazioa: $k = 5 \cdot 10^5 \cdot \exp(-5050/T)$ min⁻¹

($-\Delta H_r$) = 30 kcal/mol ; $\overline{C_v} = 0,95$ kcal/kg°C; nahastearen dentsitatea $\overline{\rho} = 1,08$ kg/l.

Ebazpena

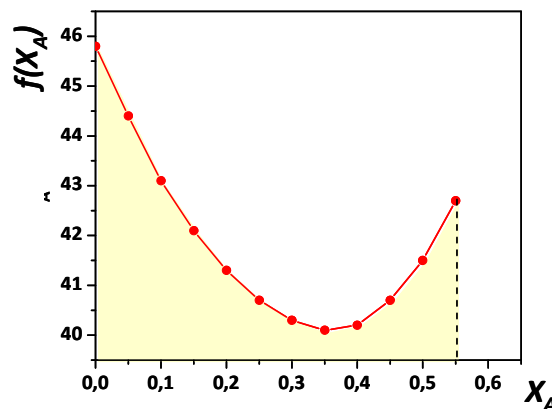
Bolumen-aldaketarik ez dagoenez, ($-r_A$)(mol/lh) = $k \cdot C_A = k \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A)$ adierazpena erabil daiteke. Masa-balantzea, berriz, hau da:

$$t_R = \frac{C_{A,0}}{k \cdot C_{A,0}} \cdot \int_0^{0,55} \frac{dX_A}{1 - X_A}$$

Integrala ebazteko, konstante zinetikoaren eta X_A -ren erlazioa lortu behar da. Horretarako, energia-balantzea erabiliko da (likido-fasean $\overline{C_p} \approx \overline{C_v}$ dela hartuz):

$$T(K) = 298(K) + \frac{30 \left(\frac{\text{kcal}}{\text{mol}} \right) \cdot 1 \text{ (mol)} \cdot X_A}{1,08(\text{kg}) \cdot 0,95 \left(\frac{\text{kcal}}{\text{kgK}} \right)} = 298 + 29,24 \cdot X_A$$

X_A	T (K)	k (min^{-1})	$f(X_A)$
0	298	0,02184	45,8
0,05	299,5	0,02373	44,4
0,1	300,9	0,02575	43,1
0,15	302,4	0,02793	42,1
0,2	303,8	0,03026	41,3
0,25	305,3	0,03277	40,7
0,3	306,8	0,03546	40,3
0,35	308,2	0,03834	40,1
0,4	309,7	0,04142	40,2
0,45	311,2	0,04472	40,7
0,5	312,6	0,04825	41,5
0,55	314,1	0,05201	42,7



Kurbaren azpiko azaleratik ondorioztatzen da $t_R = 25,1$ min-ko erreakzio-denbora behar dela.

17.4 EKUAZIO ZINETIKOEN LORPENA ERREAKTORE EZ-JARRAITUAN: METODO INTEGRATUA ETA METODO DIFERENTZIALA

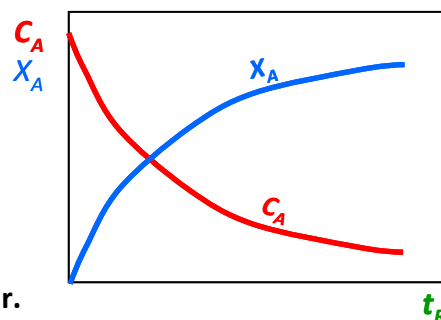
Ekuazio zinetikoak lortzeko isotermikoki diharduten erreaktore ez-jarraituak erabiltzen dira, sinpletasunagatik eta datuak lortzeko erraztasunagatik. Behin laborategian datu zinetikoak lortuta, ekuazio zinetikoa lortzeko (hau da, konstante zinetikoaren balioa eta erreakzio-ordenen balioa lortzeko) metodo integratua zein metodo diferentziala erabil daitezke.

Laborategian egindako saiakuntzan, denboran X_A -k duen aldaketari jarraipena egiten zaio (zuzenean C_A neurtuko den arren, bihurtze-mailaren definiziotik erraz lor daiteke haren balioa):

$$X_A = \frac{C_{A,0} - C_A}{C_{A,0}} \text{ baita (bolumen-aldaketarik gabeko erreakzioan).}$$

17.2 Taula. Laborategian denboran zehar neurtutako C_A -ren balioak eta X_A -ren kalkulua.

t_R	C_A	X_A
0	$C_{A,0}$	0
t_1	$C_{A,0}$	$X_{A,1}$
...
t	C_A	X_A



17.3 irudia. C_A eta X_A -ren eboluzioa denboran zehar.

Zinetika errazeko erreakzioak azalduko dira, $(-r_A) = k \cdot C_A^n$ moduan idatz daitezkeen ekuazio

zinetikoak dauzkaten erreakzioak, alegia. Gainera, bolumen-aldaketarik ez dagoeneko kasuak azalduko dira.

17.4.1 Metodo integratua

Metodo hau erabiltzeko, balio bat esleitu behar zaio erreakzio-ordenari (n), ekuazioa integratu ahal izateko. Hala, masa-balantzea integratu ondoren lortzen den adierazpenak espermentalki lortutako puntuak doitzen baditu, esleitutako ordena egokia delako da.

Ekuazio zinetikoak lortzeko, metodo integratua lehen urrats gisa erabiltzen da, 0, 1 eta 2 ordenetarako probak eginez. Hiruretako batek ere ez baditu datu espermentalak doitzen, metodo diferentzialera jotzen da. 17.1taulan agertzen dira 0, 1 eta 2 ordenako erreakzioen ekuazio zinetikoak integratuta.

Adibidea

17.8 adibidea

Erreaktore isotermoan $A \rightarrow R$ likido-faseko erreakzioa gauzatu da 30 °C-an. Kalkula dezagun ekuazio zinetikoa ($-r_A$) = $k \cdot C_A^n$ erakoa bada. Datu espermentalak taulan agertzen dira.

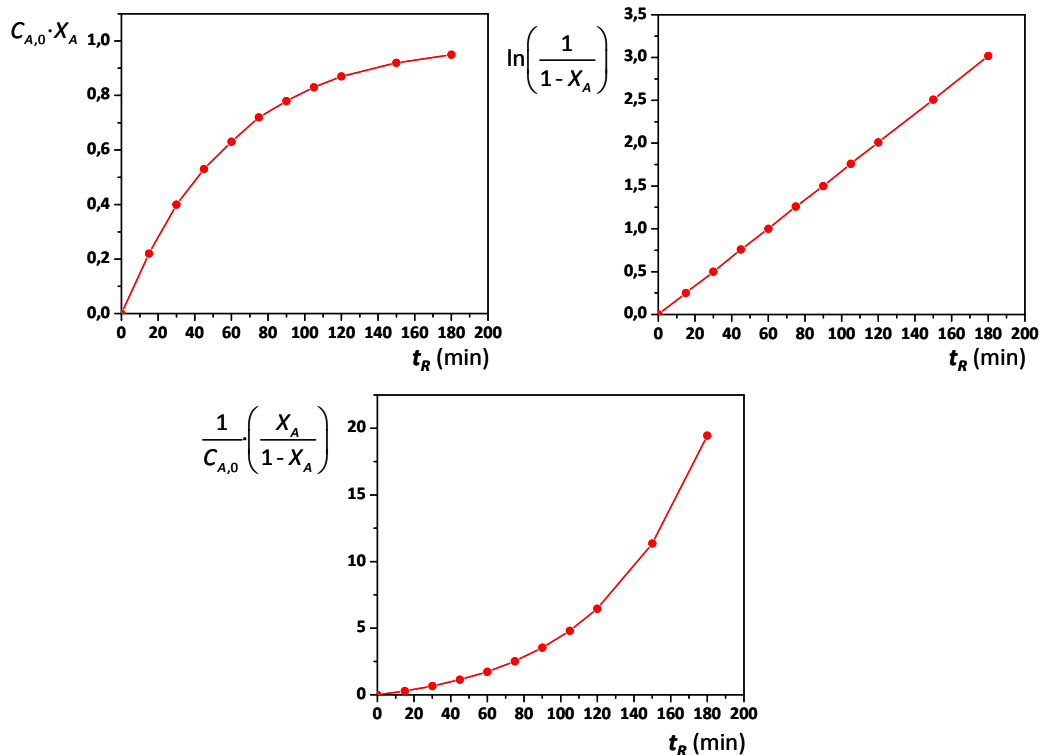
t_R (min)	0	15	30	45	60	75	90	105	120	150	180
C_A (mol/l)	1	0,778	0,605	0,47	0,366	0,284	0,221	0,172	0,134	0,081	0,0489

Ebazpena

Lehenik eta behin, denbora bakoitzean dagokion bihurtze-maila kalkulatu da. Ondoren, ordena bakoitzari dagokion ekuazio integraturako puntuak kalkulatu dira.

t_R (min)	C_A (mol/l)	X_A	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$
			$C_{A,0} \cdot X_A$	$\ln\left(\frac{1}{1 - X_A}\right)$	$\frac{X_A}{C_{A,0} \cdot (1 - X_A)}$
0	1	0	0	0	0
15	0,778	0,22	0,22	0,25	0,29
30	0,605	0,4	0,4	0,5	0,65
45	0,47	0,53	0,53	0,76	1,13
60	0,366	0,63	0,63	1	1,73
75	0,284	0,72	0,72	1,26	2,52
90	0,221	0,78	0,78	1,5	3,53
105	0,172	0,83	0,83	1,76	4,81
120	0,134	0,87	0,87	2,01	6,46
150	0,081	0,92	0,92	2,51	11,35
180	0,0489	0,95	0,95	3,02	19,45

Taulako datuak irudikatzen badira, ohartzen gara 1 ordenako ekuazioak ondo doitzen dituela. Beraz, erreakzioa lehen ordenakoa da. Arekiko, eta 30 °C-an konstante zinetikoaren balioa lerro zuzenaren malda izanik, $k = 0,0168 \text{ min}^{-1}$ lortzen da.



30 °C-an, ekuazio zinetikoa $(-r_A)$ (mol/l min) = 0,0168 · C_A da.

17.4.2 Metodo diferentziala

Erreakzio-abiaduraren definizioaren arabera (bolumen aldaketarik gabeko sistementzako),

$$(-r_A) = -\frac{dC_A}{dt} = C_{A,0} \frac{dX_A}{dt} \quad (17.20)$$

erreakzio-abiadura C_A vs t_R edo $C_{A,0} \cdot X_A$ vs t_R kurben malda da. Era berean, ekuazio zinetikoak itxura hau du:

$$(-r_A) = k \cdot C_A^n \quad (17.21)$$

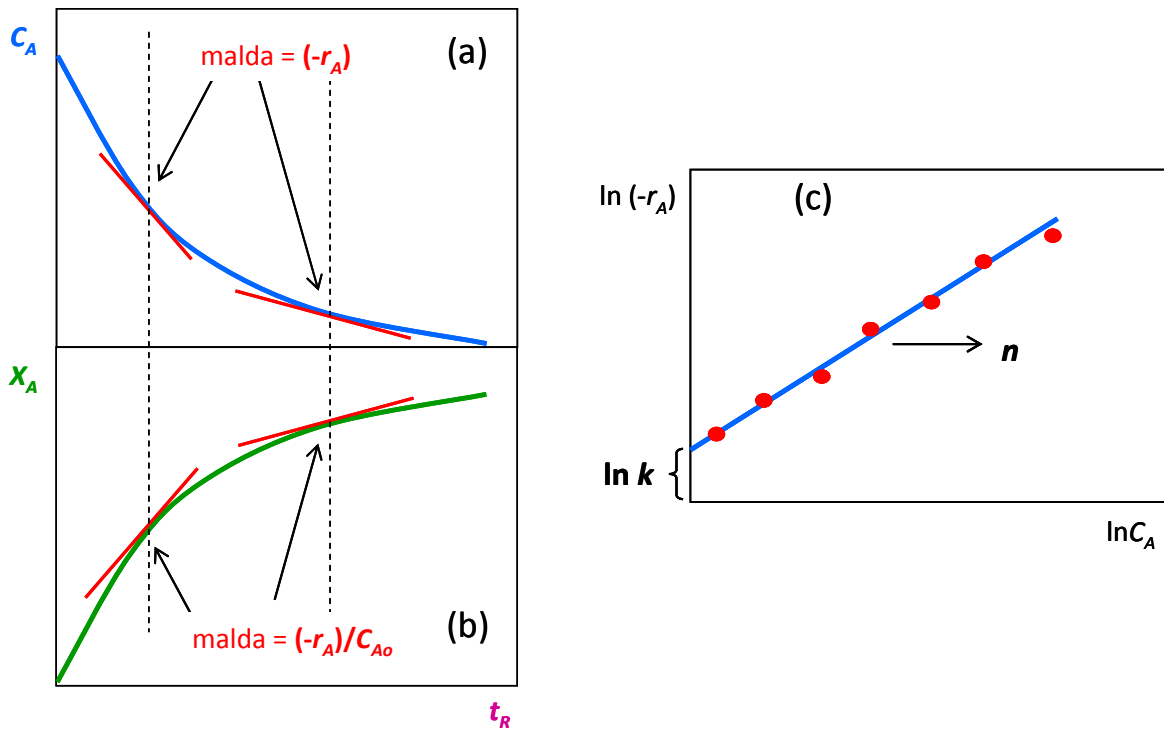
Ekuazio zinetikoan logaritmo nepertarrak hartzen badira, adierazpen hau lortzen da:

$$\ln(-r_A) = \ln k + n \cdot C_A \quad (17.22)$$

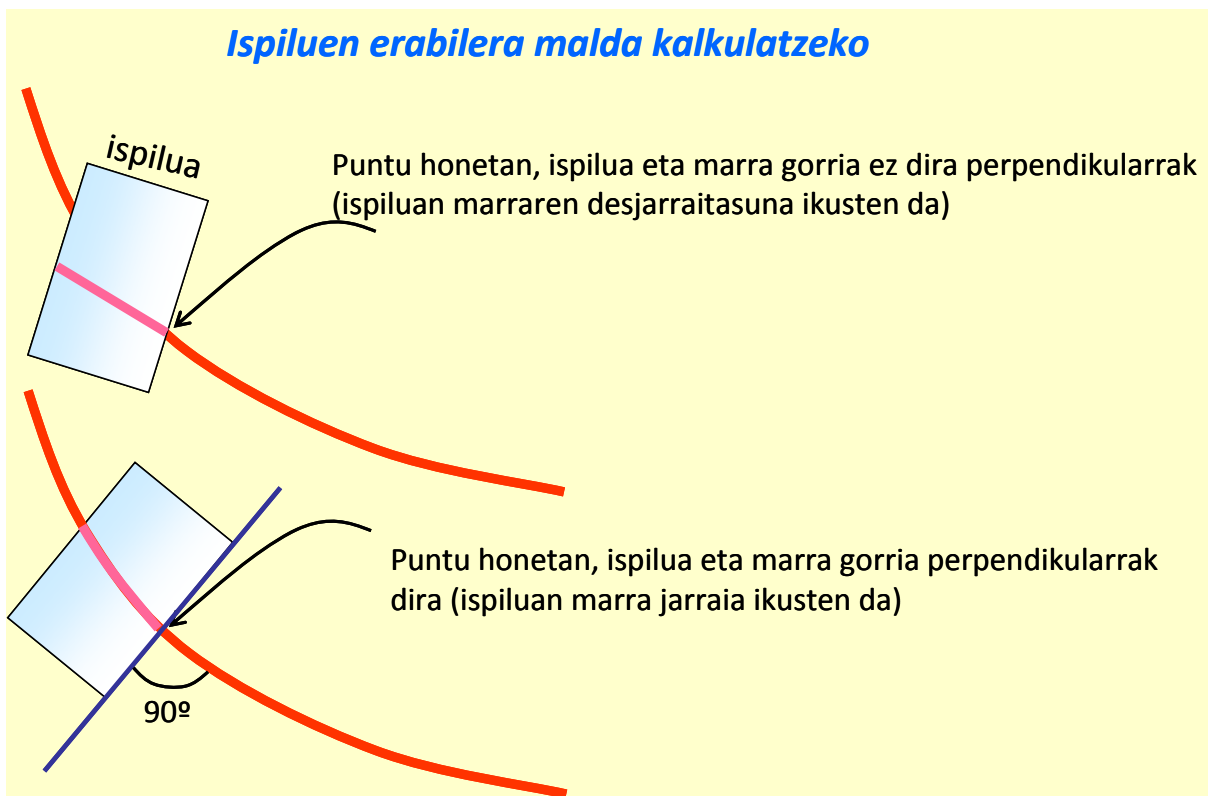
17.22 ekuazioko lerro zuzenaren maldatik erreakzio-ordena (n) kalkulatu da, eta jatorriko ordenatutik laneko tenperaturan konstante zinetikoak duen balioa lortzen da.

Laborategian lortutako datu esperimentalekin, hainbat kontzentrazioarako (edo X_A) maldak kalkulatu dira, 17.4(a) irudian agertzen den bezala. Horrela lortutako erreakzio-abiaduren logaritmo nepertarrak lerro zuzenera doitzen dira kontzentrazioen logaritmo nepertarrekin (17.4(b) irudia).

C_A vs t_R edo X_A vs t_R grafikoetan maldak kalkulatzeko era bat alde zuzeneko ispilua erabiltzea da. 17.5 irudian adierazten da ispilua nola erabiltzen den kurbako puntu batekiko zuta den lerroa kalkulatzeko. Puntu horretan zuta den lerroa lortutakoan, haren malda kalkulatu da, eta, zeinua aldatuz, kurbak puntu horretan duen malda lortuko da.



17.4 irudia. (a) eta (b) erreakzio-abiaduren kalkulua C_A vs t_R eta X_A vs t_R kurbetatik abiatuz, hurrenez hurren; (c) ordenaren kalkulua.



17.5 irudia. Alde zuzeneko ispiluen erabilera kurbarekiko lerro zutak marrazteko.

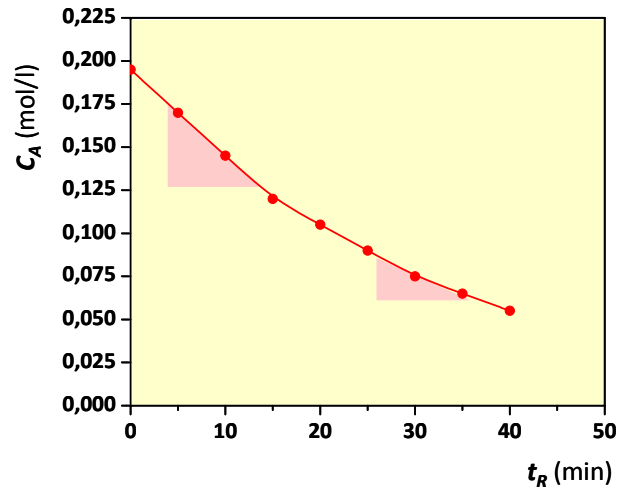
Adibidea 17.9 adibidea

Erreaktore isotermaoan $A \rightarrow R$ likido-faseko erreakzioa gauzatu da 30 °C-an, eta laborategian taulako datuak lortu dira. Kalkula dezagun ekuazio zinetikoa.

t_R (min)	0	5	10	15	20	25	30	35	40
C_A (mol/l)	0,195	0,17	0,145	0,12	0,105	0,09	0,075	0,065	0,055

Ebazpena

Lehenik eta behin, C_A vs. t grafikoa marraztuko da, hortik malda kalkulatzeko.

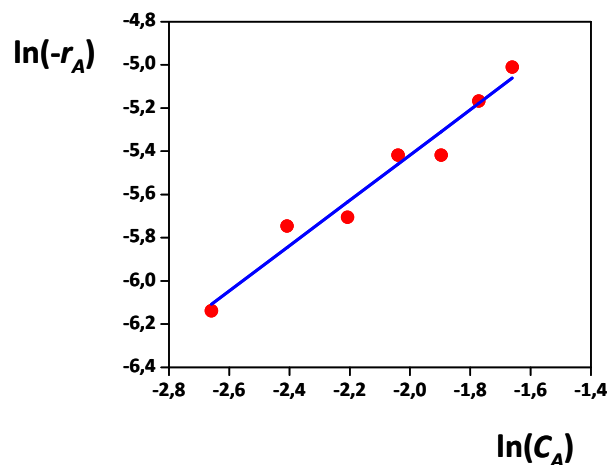


Ilundutako azaleraren malda A-ren kontzentrazio bakoitzerako erreakzio abiadura da. Ohar gaitezen C_A handietan malda handiagoa dela.

Ondoren, ispilu batez baliatuz, hainbat kontzentraziotarako maldak kalkulatu dira, taulan agertzen den bezala.

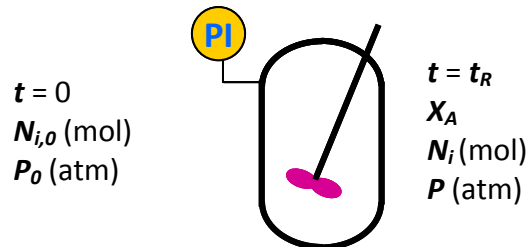
C_A (mol/l)	$(-r_A)$ (mol/l min)	$\ln C_A$	$\ln(-r_A)$
0,19	$6,67 \cdot 10^{-3}$	-1,661	-5,01
0,17	$5,70 \cdot 10^{-3}$	-1,772	-5,167
0,15	$4,44 \cdot 10^{-3}$	-1,897	-5,417
0,13	$4,44 \cdot 10^{-3}$	-2,04	-5,417
0,11	$3,33 \cdot 10^{-3}$	-2,207	-5,705
0,09	$3,20 \cdot 10^{-3}$	-2,408	-5,745
0,07	$2,16 \cdot 10^{-3}$	-2,659	-6,138

Amaitzeko, $\ln(-r_A)$ vs $\ln C_A$ irudikatzen da. Maldatik ordenaren balioa eratorriko da ($n = 1,05$, hau da, lehen ordenakoa) eta jatorriko ordenatutik ($\ln k = -3,319$) 30 °C-ko konstante zinetikoaren balioa lortuko da: $k = 0,032 \text{ min}^{-1}$.



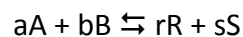
17.5 GAS FASEKO ERREAKZIOEN BIHURTZE-MAILAREN JARRAIPENA PRESIOA NEURTUZ

Bolumen eta tenperatura konstantean ematen diren gas-faseko erreakzioen jarraipena, $\Delta n \neq 0$ bada, sistema osoko presio neurtuz egin daiteke. Sistema osoko presioa, sistema osoko molen araberakoa da, gas idealen legea betez gero: $P = nRT/V$. 17.6 irudian agertzen da honelako erreakzio baten jarraipena nola egiten den.



17.6 irudia. Gas faseko erreakzioen jarraipena sistema osoko presioa jarraituz.

Sistema osoko presioa handitu egiten da, erreakzioa gertatu ahala mol kantitatea handitzen bada; presioa gutxitu egiten da erreakzioa eman ahala mol kantitatea gutxitzen bada. Demagun ondoko erreakzioa egiten dela:



Hasieran erreaktorera sartzen diren molak hauek badira:

A	B	R	S	In	Sistema
$N_{A,0}$	$N_{B,0}$	$N_{R,0}$	$N_{S,0}$	N_{In}	N_0

$N_0 = N_{A,0} + N_{B,0} + N_{R,0} + N_{S,0} + N_{In}$ izanik.

Bakoitzaren presio partziala $P_i = N_i \cdot RT/V$ adierazpenaren bidez kalkula daiteke. Sistema osoko presioa, beraz:

$$P_0 = \frac{N_0 \cdot RT}{V} \quad (17.23)$$

t_R denbora ondoren osagai mugatzailearen $N_{A,0} \cdot X_A$ mol bihurtu bada, erreaktorean dauden molak ondokoak dira:

A	B	R	S	In	Sistema
$N_{A,0} \cdot (1 - X_A)$	$N_{B,0} - (b/a) \cdot (1 - X_A)$	$N_{R,0} + (r/a) \cdot (1 - X_A)$	$N_{S,0} + (s/a) \cdot (1 - X_A)$	N_{In}	N

$N = N_A + N_B + N_R + N_S + N_{In}$ izanik. Adierazpen hau A-ren bihurtze-mailaren araberakoa da:

$$N = N_0 + \frac{\Delta n}{a} \cdot (N_{A,0} \cdot X_A) \quad (17.24)$$

Δn koefiziente estekiometrikoen diferentzia izanik. Adierazpeneko terminoak presio moduan idazten badira, eta adierazpena birmoldatzen bada:

$$P_A = P_{A,0} + \frac{a}{\Delta n} \cdot (P_0 - P) \quad (17.25)$$

Edozein J erreaktiboren kasuan:

$$P_J = P_{J,0} + \frac{j}{\Delta n} \cdot (P_0 - P) \quad (17.26)$$

Edozein K produkturen kasuan:

$$P_k = P_{k,0} + \frac{k}{\Delta n} (P_0 - P) \quad (17.27)$$

A-ren bihurtze-maila kalkulatu nahi izanez gero:

$$X_A = \frac{a}{\Delta n} \cdot \frac{(P - P_0)}{P_{A,0}} \quad (17.28)$$

Adibidea 17.10 adibidea

Erreaktore isotermoan $A \rightarrow 2R$ gas-faseko erreakzioa gauzatu da 30 °C-an bolumen konstanteko erreaktore ez-jarraituan, erreaktorea A osagai puruaz bete ondoren. Manometroaren bidez, sistemako presioaren jarraipena egin da denboran. Ondoko datuak lortu dira:

t_R (min)	0	0,2	0,9	1,2	2,1	7	19
P (mmHg)	760	870,2	1121	1181,8	1273	1425	1482

Kalkula dezagun ekuazio zinetikoa 30 °C-an.

Ebazpena

Erreaktorea A osagai puruaz bete bada: $P_0 = 760$ mmHg eta $P_{A,0} = 760$ mmHg dira. 17.28 ekuazioa erabilia, taula bete da:

t_R (min)	0	0,2	0,9	1,2	2,1	7	19
P_A (mmHg)	760	649,8	399	338,2	247	95	38
X_A	0	0,145	0,475	0,555	0,675	0,875	0,95

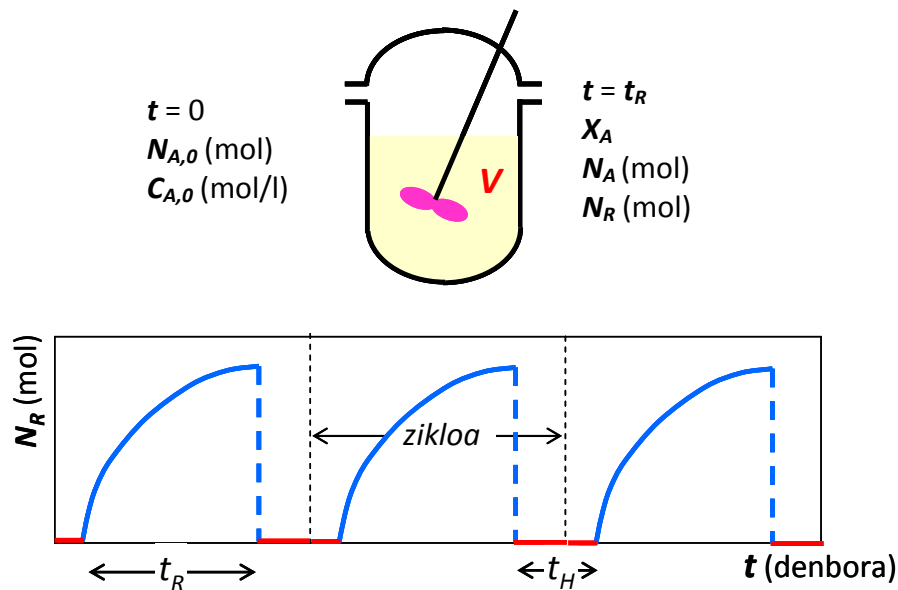
Hemendik aurrera metodo integratua zein diferentziala erabili daiteke. Lehena aukeratzen bada eta $(-r_A) = k \cdot C_A^n$ eran idazten bada, bigarren ordenako erreakzioa dela ikusten da eta $k = 24,85$ l/mol·min, $C_{A,0} = 0,04025$ mol/l delako (gas idealen legearen arabera).

17.6 ERREAKTORE EZ-JARRAITUEN ERAGIKETA

Erreaktore ez-jarraituaren eragiketa ziklikoa da. Prozesua hastean, erreaktorea lehengaiz betetzen da, eta erreakzio-kondizioak hartu arte (tenperatura, irabiatze-maila eta presio egokia lortu arte), aldi bat pasatzen da erreakzioa hasi gabe. Behin erreakzioa burutzeko kondizio egokiak lortuta, erreakzioa hasten da eta, dirauen bitartean, (erreakzio-denbora) erreaktibo desagertuz eta produktua sortuz doa. Denbora-tarte horretan, erreaktore barruko nahastea produktuan aberastuz doa. Nahi den bihurtze-maila lortzen denean, erreakzioa eten egiten da, eta barruko nahastea hustu egiten da; hala, bigarren zikloa hasteko prest dago.

Prozesu zikliko honetan, denbora-tarte batean produktua ekoizten ari den bitartean (erreakzio-denboran, t_R), beste denbora-tarte batean ez dago ekoizpenik (erreaktorea betetzeko garaian, husteko garaian, kondizioak egokitzeko garaian eta abar) (ikusi 17.7 irudia). Erreakziorik gertatzen ez den denbora horien batura **denbora hila** da (t_H), eta prozesuaren ekonomian eta etekin osoan eragin handia du. Denbora kronologikoak bi denbora horiek bereizi behar ditu:

$$t = t_R + t_H \quad (17.29)$$



17.7 irudia. Erreaktore ez-jarraituaren denboran zeharreko eragiketa.

Adibidea 17.11 adibidea

50 l-ko bolumeneko erreaktore ez-jarraitu batean, $A \rightarrow B$ erreakzioa isotermikoki gauzatzen da, eta $C_{A,0} = 1 \text{ mol/l}$ da. Erreakzio-denbora eta denbora hila 3 h eta 3 h dira, hurrenez hurren. Kalkula itzazu (a) Bren eguneko ekoizpena, (b) Aren hasierako kontzentrazio beretik abiatu rik 95 mol B/egun ekoitzi nahi bada, erreakzioak zenbat denbora iraun behar duen. Datuak: ekuazio zinetikoa $(-r_A)(\text{mol/l h}) = 0,2 \cdot C_A$ da.

Ebazpena

Erreakzioa lehen ordenakoa bada A erreaktiboarekiko, masa-balantzearen adierazpena integratzean, X_A vs t_R eboluzio hau lortzen da (17.16 ekuazioaren birmoldaketa):

$$\ln \frac{1}{(1 - X_A)} = k \cdot t_R$$

Hortik, $X_A = 1 - \exp(-k \cdot t_R)$ eratoritzen da (17.16.a adierazpena).

Erreakzio-denbora 3 h bada, ziklo bakoitzean 0,45eko bihurtze-maila lortzen da. Bren masa-balantzea egiten bada:

$$N_B = N_{B,0} + N_{A,0} \cdot X_A = V \cdot C_{A,0} \cdot \left(1 - e^{(-k \cdot t_R)}\right)$$

(a) Zikloko Bren ekoizpena (16.9 ekuazioa)

$$P_{Z,B} = 50(l) \cdot 1 \left(\frac{\text{mol}}{l}\right) \cdot 0,45 \left(\frac{1}{\text{ziklo}}\right) = 22,5 \text{ mol/ziklo}$$

Eguneko zenbat B ekoitzen den kalkulatzeko, egun bakoitzean zenbat ziklo osatzen diren kalkulatu da:

$$\frac{24 \text{ h}}{\text{egun}} \cdot \frac{1 \text{ ziklo}}{(3+3) \text{ h}} = 4 \frac{\text{ziklo}}{\text{egun}}$$

$$P_B \left(\frac{\text{mol}}{\text{egun}}\right) = 22,5 \left(\frac{\text{mol}}{\text{ziklo}}\right) \cdot 4 \left(\frac{\text{ziklo}}{\text{egun}}\right) = 90 \text{ mol/egun}$$

(b) B produktuaren zikloko ekoizpena kalkulatu bada:

$$P_{Z,B} \left(\frac{\text{mol}}{\text{ziklo}} \right) = 95 \frac{\text{mol}}{\text{egun}} \cdot \frac{1 \text{ egun}}{24 \text{ h}} \cdot \frac{(t_R + 3) \text{ h}}{1 \text{ ziklo}}$$

Bestalde, Bren masa-balantzetik:

$$P_{Z,B} \left(\frac{\text{mol}}{\text{ziklo}} \right) = 50 (\text{mol}) \cdot \left(1 - e^{(-0,2 \cdot t_R)} \right)$$

Biak berdintzen badira, $t_R = 4,66$ h-ko erreakzio-denbora eskatzen du, eta $X_A = 0,606$ da.

17.7 ERREAKZIO-DENBORAREN OPTIMIZAZIOA

Zenbat eta erreakzio-denbora luzeagoarekin jardun erreaktore ez-jarraituan, orduan eta produktu gehiago lortzen da ziklo bakoitzean; bestalde, ziklo bakoitzaren denbora luzatzen denez, ziklo gutxiago egin daitezke egunean. Beraz, erreaktore horiek lan egiteko denbora optimoa dute. Erreaktoreen funtzionamendua optimizatzeko irizpide bat hau da: **produktuaren batez besteko ekoizpen-abiadura maximoa** egiten duen erreakzio-denbora (t_R^*).

Demagun erreakzio hau gauzatzen dela erreaktore ez-jarraituan: $A \rightarrow R$.

Erreaktorean, R produktuaren batez besteko ekoizpen-abiadura hau lortzen da:

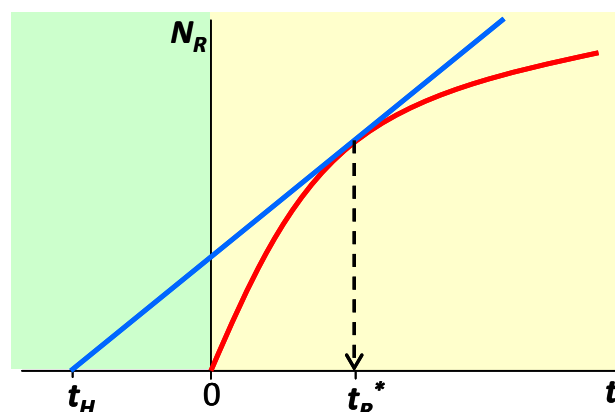
$$\bar{r}_R \left(\frac{\text{mol}}{\text{denbora}} \right) = \frac{N_R}{(t_R + t_H)} \quad (17.30)$$

Batez besteko ekoizpen-abiadura maximoa izan dadin, t_R aldagaiarekiko deribatuak zero izan behar du:

$$\frac{d\bar{r}_R}{dt_R} = \frac{\frac{dN_R}{dt_R} \cdot (t_R + t_H) - N_R}{(t_R + t_H)^2} = 0 \quad (17.31)$$

$$\frac{dN_R}{dt_R} = \frac{N_R}{(t_R + t_H)} \quad (17.32)$$

17.32 ekuazioan adierazten den baldintzaren interpretazio grafikoa 17.8 irudian adierazten da. Erreaktorean denborarekiko zenbat mol R dauden adierazten duen kurba erreakzio-ordenaren arabera da.



17.8 irudia. R produktuaren batez besteko ekoizpen-abiadura maximoa egiten duen erreakzio-denbora optimoaren kalkulu grafikoa.

Adibidea 17.11 adibidea

A + B → 2R erreakzioaren bidez R produktua ekoizten da erreaktore ez-jarraituan. 100 l-ko erreaktorea $C_{A,0} = C_{B,0} = 2$ mol/l-ko kontzentrazioz betetzen da eta R-ren ekoizpena hasten da isotermikoki. Denbora hila 5 h bada, kalkula dezagun erreakzio-denbora optimoa R-ren batez besteko ekoizpen-abiadura maximoa izan dadin.

Datuak: erreakzioaren ekuazio zinetikoa $(-r_A)$ (mol/l h) = $0,1 \cdot C_A \cdot C_B$ da.

Ebazpena

A eta B erreaktiboak estekiometrikoki daudenez, une oro $C_A = C_B$ da, eta $(-r_A) = 0,1 \cdot C_A^2$ erabiliko da.

Bigarren ordenakoa izanik,

$$\frac{1}{C_{A,0}} \cdot \left(\frac{X_A}{1 - X_A} \right) = k \cdot t_R$$

eta

$$X_A = \frac{k \cdot t_R \cdot C_{A,0}}{1 + k \cdot t_R \cdot C_{A,0}}$$

R-ren masa-balantzeak hau ematen du:

$$N_R = \cancel{N_{R,0}} + 2 \cdot N_{A,0} \cdot X_A = 2 \cdot V \cdot C_{A,0} \cdot \left(\frac{k \cdot t_R \cdot C_{A,0}}{1 + k \cdot t_R \cdot C_{A,0}} \right)$$

$$N_R = 2 \cdot 100 \cdot 2 \cdot \left(\frac{0,1 \cdot t_R \cdot 2}{1 + 0,1 \cdot t_R \cdot 2} \right)$$

Ebazpen analitikoa

$$\frac{dN_R}{dt_R} = \frac{80 \cdot (1 + t_R \cdot 0,2) - 0,2 \cdot 80 \cdot t_R}{(1 + 0,2 \cdot t_R)^2}$$

$$\frac{N_R}{(t_R + t_H)} = \frac{80 \cdot t_R}{(1 + 0,2 \cdot t_R) \cdot (5 + t_R)}$$

Biak berdintzen badira: $t_R^* = 5$ h, eta horren arabera $X_A = 0,5$.

Ebazpen grafikoa

