

## Kem-40.152 Reaktiotekniikka II

Tentti to 25.4.2002 14-19 Ke1

### TEORiatehtävät (yhteensä 12p)

Tehtävät 1 ja 2 ovat teoriatehtäviä ja niiden aikana ei materiaalia saa olla esillä. Materiaalin saa ottaa esiin kun tehtävät 1 ja 2 on tehty ja paperi on palautettu. Jos vastaat tehtäväpaperille palauta se.

1a. Katalyyttireaktion nopeus voidaan määrittää eri tavoin. Jos kokeellisesti saatu arvo on laskettu katalyytin pinta-alaa kohti, mitä tietoja tarvitaan jotta reaktionopeus voidaan laskea katalyytin massaa tai tilavuutta kohti? Esitä riippuvuudet.

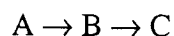
1b. Määrittele sisäinen tehokkuuskerroin. Minkälaisia arvoja se voi saada eri tilanteissa?

1c. Erään katalyyttireaktion nopeusyhtälö on muotoa:

$$-r_A' = \frac{kP_A P_B}{1 + K_A P_A}$$

Kirjoita nopeusyhtälö yleisessä muodossa A:n konversion funktiona.

2. Joukko irreversiibileitä sarjassa tapahtuvia alkeisreaktiota, jotka ovat muotoa:



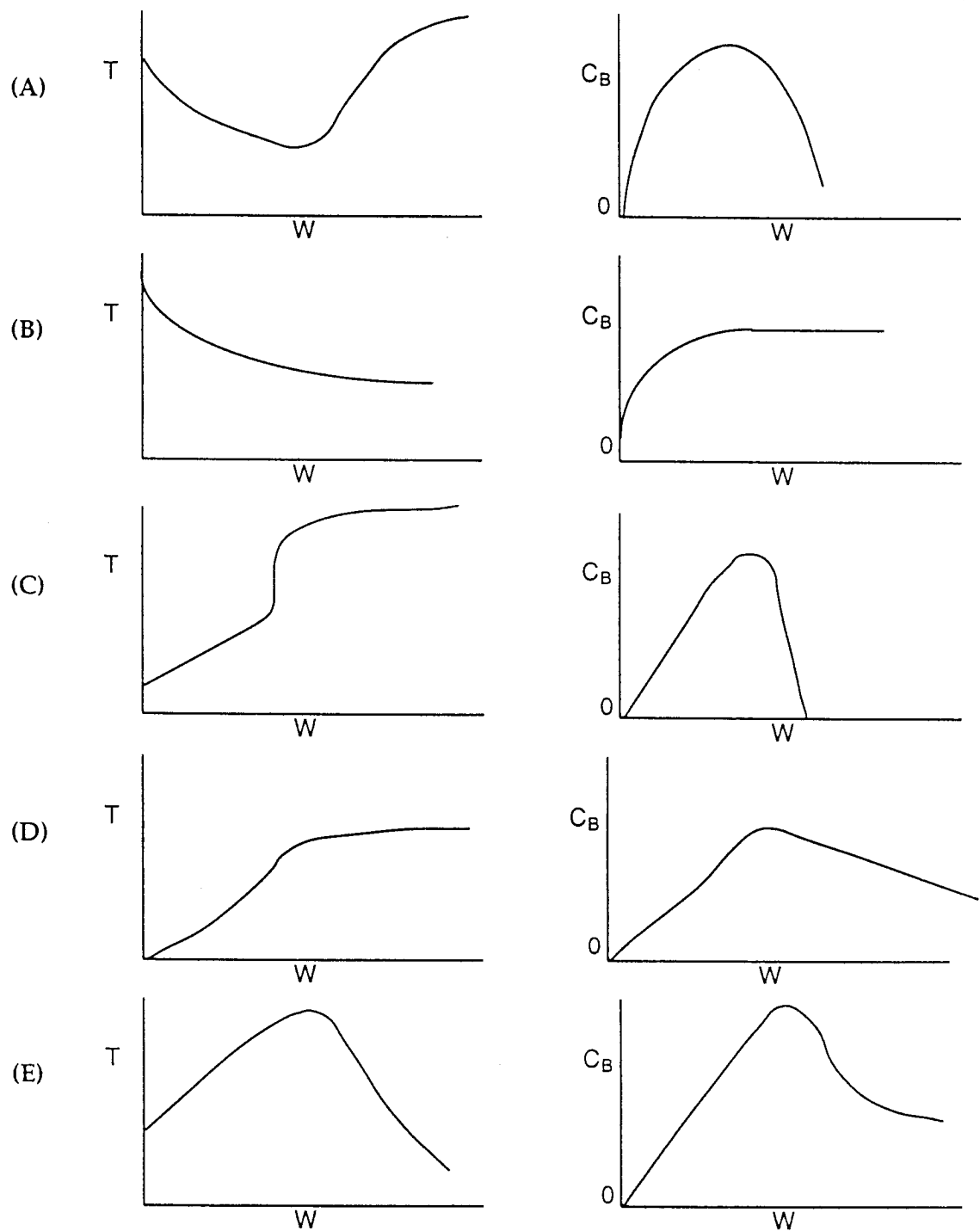
suoritettiin adiabaattisessa kiinteällä katalyyttipatjalla varustetussa putkireaktorissa. Saaduista koetuloksista saatiin kuvan 1. mukaiset riippuvuudet.

a) Mikä/mitkä kuvan 1. tapauksista esittää/esittävät tilannetta, jossa ensimmäinen reaktio on endoterminen ja toinen eksoterminen? Perustele vastauksesi.

b) Entä mikä/mitkä kuvan tapauksista esittää/esittävät tilannetta, jossa ensimmäinen reaktio on eksoterminen ja toinen endoterminen? Perustele vastauksesi.

c) Mikä/mitkä tapauksista esittää/esittävät tilannetta, jossa toisen reaktion ( $B \rightarrow C$ ) Arrheniuksen yhtälön frekvensitekijä on hyvin alhainen ja aktivoitumisenergia hyvin suuri verrattuna ensimmäiseen reaktioon ( $A \rightarrow B$ )? Perustele vastauksesi.

d) Mikä/mitkä tapauksista esittää/esittävät tilannetta, jossa molemmat reaktiot ovat eksotermisiä? Perustele vastauksesi.



Kuva 1. Lämpötila ( $T$ ) katalyyttimäärän ( $W$ ) funktiona ja konsentraatio ( $C_B$ ) katalyyttimäärän ( $W$ ) funktiona joukolle sarjassa tapahtuvia alkeisreaktioita.

## Kem-40.152 Reaktiotekniikka II

Tentti to 25.4.2002 14-19 Ke1

### LASKUTEHTÄVÄT (yhteensä 12p)

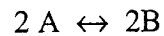
Laskutehtävissä saa olla mukana kirjallisuutta poislukien laskuharjoitukset, kotilaskut ja valmiit laskuratkaisut. Tehtävät 1 ja 2 ovat teorian tehtäviä ja niiden aikana ei materiaalia saa olla esillä. Materiaalin saa ottaa esiin kun tehtävät 1 ja 2 on tehty ja paperi on palautettu. Jos vastaat tehtäväpaperille palauta se.

3. Metanolin (ME) dehydratointia dimetyylieetteriksi (DME) ja vedeksi ( $\text{H}_2\text{O}$ ) tutkittiin pakatussa putkireaktorissa (packed bed) käyttäen katalyyttinä ionivaihtohartsia. Reaktori paineistettiin inertillä tyypellä ( $\text{N}_2$ ) ja reaktio käynnistettiin syöttämällä puhdasta metanolikaasua reaktoriin lämpötilassa 413 K, paineessa 100 kPa ja virtausnopeudella  $0,2 \text{ cm}^3/\text{s}$ . Komponenttien osapaineet reaktorin ulostulossa ajan funktiona on esitetty alla olevassa taulukossa. Reaktorin tilavuus oli  $4,5 \text{ cm}^3$  ja katalyyttimäärä 1 g.

t(s)	0	10	50	100	150	200	300
$P_{\text{N}_2}$ (kPa)	100	50	10	2	0	0	0
$P_{\text{ME}}$ (kPa)	0	2	15	23	25	26	26
$P_{\text{H}_2\text{O}}$ (kPa)	0	10	15	30	35	37	37
$P_{\text{DME}}$ (kPa)	0	38	60	45	40	37	37

- Johda mekanismi, joka kuvaa koetuloksia?
- Esitä koesuunnitelma, jolla voisit tarkistaa mekanismin oikeellisuuden.

4. Tasapainoreaktio (reversiibeli) halutaan suorittaa kaasufaasissa. Reaktio on eksoterminen ja sitä voidaan pitää alkeisreaktiona. Reaktion stoikiometria on seuraava.



Puhdasta A:ta syötetään virtausnopeudella 100 mol/min, jossa A:n konsentraatio on 1 mol/dm<sup>3</sup>. A:n ja B:n lämpökapasiteetit ovat 16 J/(mol×K). Syötön lämpötila on 50°C.

Kannattaako reaktio suorittaa adiabaattisesti vai isotermisesti? Jos haluat suorittaa reaktion isotermisesti kuinka suuri on jäähdystarve? Käytettävissä olevan jäähdytysveden lämpötila on 20°C.

Valitse reaktori putkireaktori (PFR) tai jatkuvatoiminen sekoitusreaktori (CSTR), jossa suorittaisit reaktion. Perustele valintasi.

Miten mitoittaisit reaktorisi?

Tasapainovakion lämpötilariippuvuus:

$$K_C(T) = 100 \times \exp[-20000/8,314 \times (1/500 - 1/T)]$$

Reaktionopeusvakion lämpötilariippuvuus:

$$k(T) = 0.1 \times \exp[-8000/8,314 \times (1/273 - 1/T)] \quad [\text{dm}^3/(\text{mol h})]$$