

Johdatus prosesseihin, Tenti 9.3.2010 klo 13-16

Malliratkaisu nähtävissä tentin jälkeen, noin klo 17 Optimassa.

Muista myös vastata Oodissa olevaan kurssipalaute kyselyyn!

1) Selitä lyhyesti: (muutamalla lauseella, tarvittaessa perustellen tai esimerkein)

a) Vihreä kemia

b) Atomiekonomia

c) Reaktiolämpö

d) Heterogeeninen katalyyssi

e) Miksi reaktio $2 \text{H}_2(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow 2 \text{H}_2\text{O}(\text{g})$ ei tapahdu huoneenlämpötilassa

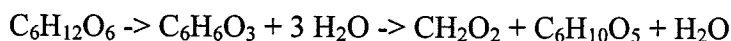
f) Jos seuraavan reaktion $\text{C}(\text{s}) + \text{H}_2\text{O}(\text{g}) \rightleftharpoons \text{H}_2(\text{g}) + \text{CO}(\text{g})$ Gibbsin energian muutoksen arvo ΔG on positiivinen lämpötilassa 300 K, kumpaan suuntaa reaktio etenee, eli mitkä ovat lähtöaineita ja mitkä tuotteita?

2 a) Ainetaseen rooli prosessiteollisuuden ympäristövaikutusten arvioinnissa, esimerkkinä tuotantolaitoksen ympäristölupa.

b) Mitä asioita pitää huomioida suunniteltaessa uutta kemiallista prosessia tai mahdollisesti arvioitaessa olemassa olevaan prosessiin tarvittavia muutoksi.

c) Mainitse jokin esimerkki bioprosessista ja esitä lyhyt kuvaus siitä, esitellen erityisesti bioprosesseille tyypillisiä piirteitä ja niiden vaikutuksia.

3 a) Vesiliuoksessa olevaa glukoosia ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$) voidaan dehydratoida happokatalyytillä hydroksimetyyli furfuraaliksi ($\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_3$), reaktiossa glukoosimolekyylistä irtoaa kolme vesimolekyyliä. Ensimmäisessä reaktiossa tuotteena muodostunut hydroksimetyyli furfuraali reagoi edelleen vesiliuoksessa, myös hapon katalysoimana, hajoten muurahaishapoksi (CH_2O_2) ja levuliinihapoksi ($\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_5$). Reaktioyhtälö on esitetty kokonaisuudessaan alla.



Reaktion välituotteena muodostuva hydroksimetyyli furfuraali on hyvä lähtöaine monien orgaanisten kemikaalien ja nestemäisten liikennepolttoaineiden tuottamiseksi. Lisäksi sen valmistamiseen lähtöaineena käytettävä, uusiutuvasta lignoselluloosapohjaisesta biomassasta saatava glukoosi tekee reaktiosta kiinnostavan erityisesti liikennepolttoaineiden kannalta.

Tehtäväsi on ideaalireaktoreista olevien tietojesi perusteella esitellä ja perustella paras mahdollinen ideaalireaktorityyppi, jonka pohjalta hydroksimetyyli furfuraalin tuotantoon sopivaa reaktoria kannattaisi lähteä rakentamaan. Prosessissa on tarkoitus käyttää happokatalyyttinä kiinteää Nafion ioninvaihtohartsia, jossa pinnalle kiinnitettynä aktiivisena aineena toimivat sulfonihapporyhmät. Reaktiolämmön arvoiksi on mitattu ensimmäiselle reaktiolla 10 kJ/mol ja toiselle reaktiolla 8 kJ/mol.

3 b) Esitä ainetaseen yleisestä muodosta lähtien valitsemasi reaktorityypin ainetase huomioiden kyseiden reaktorin ideaalioletukset.

4) Kuvaa esimerkkien avulla katalyyzin roolia vihreän kemian periaatteiden mukaisten prosessien kehityksessä.

5) Biodieselin valmistuksessa transesterointireaktiolla sivutuotteena syntyy glyserolia, $C_3H_8O_3$. Tätä sivutuoteglyserolia voidaan hyödyntää raaka-aineena vedyn ja alkaanien valmistuksessa vesifaasireformointireaktiossa.

Esimerkiksi 250°C lämpötilassa ja 525 psi:n paineessa 1 % platinametallia sisältävä Al_2O_3 katalyytti katalysoi pääasiassa vedyn muodostusta, jolloin ulostulevan kaasuseoksen koostumus on esitetty alla olevassa taulukossa. Syöttönä on käytetty 10 paino-% glyserolin vesiliuosta ja reaktorin ulostulovirta sisältää tuotteiden lisäksi vielä 0,5 paino-% glyserolia.

Taulukko. Reaktorista ulostulevan kaasuseoksen koostumus.

komponentti	H_2	CO_2	alkaanit (CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8)
mooli - %	61,9	34,2	3,9

Kaasufaasi on analysoitu reaktorin jälkeen tehdyn kaasu-neste-erotuksen jälkeen ja voidaan olettaa, että kaikki reagoimatta jäänyt glyseroli on nestefaasissa ja kaikki muodostuneet tuotteet ovat tässä analysoidussa kaasufaasissa.

Laske glyserolin konversio kyseisessä reaktiossa, sekä glyserolin selektiivisyys sekä vedyksi, että alkaaneiksi. Entä mikä on vedyn saanto?

Edellä kuvatulla koejärjestelyllä on mitattu reaktionopeuden ja konversion riippuvuudeksi seuraavanlainen yhtälö $-r_{gly} = 0,9 \text{ min}^{-1} * C_{gly 0} * (1 - X_{gly})$, jossa $C_{gly 0}$ on glyserolin konsentraatio syötössä ja X_{gly} on glyserolin konversio.

Laske sopivatko tarjolla olevan 3 litran sekoitussäiliöreaktori ja 1,5 litran putkivirtausreaktori glyserolin nestefaasireformoinnin pilotointikokeisiin jos konversiovaatimus on vähintään 90 % ja syöttövirtaukseksi halutaan 0,5 litra/min.