

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

Onsdagen den 11 april 2012 kl 8:30-13:30 i Väg och vattensalarna

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

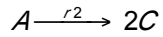
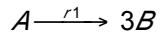
Betygskala:

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



Uppgift 1 (6 poäng)

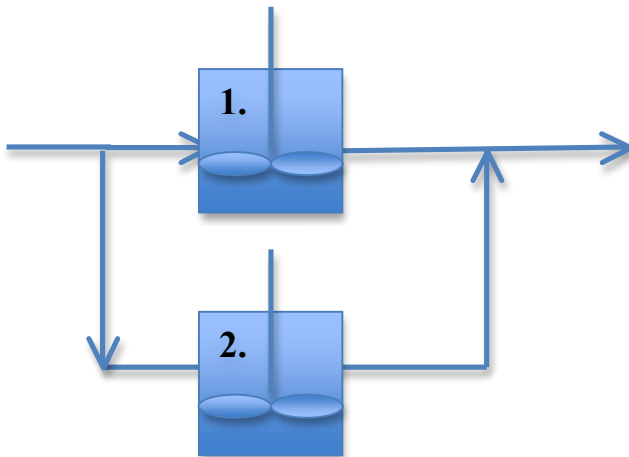
Följande reaktioner sker i **gasfas**:



Reaktionen är första ordningen med avseende på den reagerande komponenten. Reaktionen sker i två tankreaktorer. Vad blir selektiviteten av C ut från hela anläggningen?

Data nedan är given. Sätt upp **alla** ekvationer som behövs för att lösa uppgiften. Beskriv lösningsgång noggrant. Ekvationer behöver ej lösas. Reaktionerna sker vid atmosfärstryck och temperaturen T.

Hastighetskonstant, k_1
Hastighetskonstant, k_2
Flöde in till hela systemet, q
Koncentration av A i inflödet, C_{Af}
40% av flödet ut från reaktorn som går in i tank 2
Volym tank 1, V_1
Volym tank 2, V_2



Uppgift 2 (6 poäng)

I en oideal tubreaktor utfördes följande spårämnesförsök:

t (min)	c(t) (mol/m ³)
0	0
2	4
5	10
7	14
10	9
14	4
16	1

Vätskefasreaktionen $A \rightarrow B$ är av första ordningen map A.

- Vad är omsättningsgraden ut från reaktorn?
- Om du använt tankseriemodellen, hur många tankar behövs? Vilka skillnader förväntar du dig mellan tankseriemodell och segregationsmodellen?

Storleken på tubreaktorn är 20cm lång och 3cm i diameter och koncentrationen av A i infödet är 400mol/m³ och flödet 0.0003 m³/s.

För att undersöka kinetiken görs separata experiment i en annan tubreaktor och koncentrationen av A i inflödet är 400mol/m³. Denna reaktor kan betraktas som ideal och har dimensionerna 25 cm lång och 4 cm i diameter. Omsättningsgraden är 42% och flödet 0.0003 m³/s.

Uppgift 3 (6 poäng)

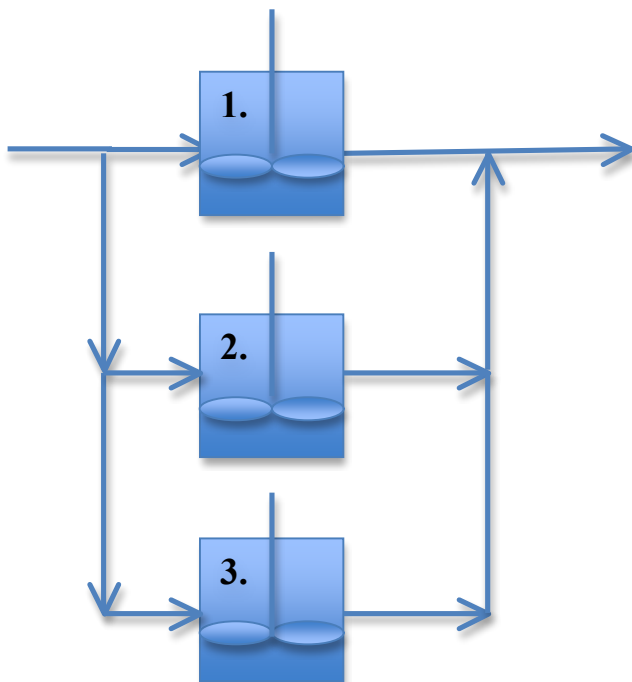
För att öka omsättningen av en exoterm jämviktsreaktion $A \rightleftharpoons B$ används så kallad cold-shot. Rita upp en schematisk bild över hur cold-shot går till. Rita ut beteckningar på alla strömmar. Sätt sedan upp alla ekvationer som behövs för att lösa omsättningsgraden ut från systemet. Alla införda beteckningar måste föras in i figuren eller beskrivas med ord. Beskriv lösningsgången noggrant. Inga ekvationer behöver lösas.

Uppgift 4 (6 poäng)

I nedanstående anläggningar finns tre omrörda tankreaktorer. De har olika stora katalysatorpartiklar och olika omrörarhastighet, vilket gör att de har olika inverkan av mass-transport. I tank 1 är yttre masstransport viktig, i tank 2 inre masstransport och i tank 3 är både yttre och inre masstransport viktiga. 30% av flödet går via tank 1 och 20% via tank 2. Vad blir omsättningsgraden av A ut från hela anläggningen?

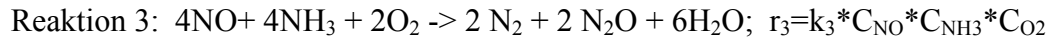
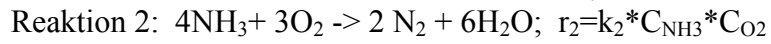
Reaktionen är i vätskefas och är $A \rightarrow B$. Följande data gäller:

Sh, tank 1 och 3	2
Diffusivitet, tank 1 och 3	$10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
Partikeldiameter, tank 1	1 μm
Partikeldiameter, tank 2 och 3	1 mm
Volym, tank 1	0.3 m^3
Volym, tank 2	0.5 m^3
Volym, tank 3	0.6 m^3
Koncentration av A in till anläggningen	300 mol/m^3
Totala flödet in till anläggningen	2.5 m^3/min
Hastighetskonstanten	0.1 s^{-1} (även $3 \cdot 10^{-6} \text{ m/s}$)
Effektiv diffusivitet, tank 2 och 3	$3 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$



Uppgift 5 (6 poäng)

SCR katalysatorer används för att rena avgaser från fordon från kväveoxider (NO_x). Följande reaktioner är viktiga:



Syre finns i stort överskott.

Sätt upp ekvationerna för att beräkna selektiviteten av N₂O varierar med tiden. Reaktionen sker i en tubreaktor men man kan med fördel beskriva den som en tankserie. Inga ekvationer behöver lösas men alla ekvationer som behövs skall ställas upp och lösningsmetoden beskrivas.

1. KRT, KK100, 2012-04-11

Gasfas med moländrom



Sökt: Selektiviteten av C:

$$S_C = \frac{F_C}{F_{Am} - F_{Aout}}$$

Tank 1: 60% flöde $F_{Am} = 0,6 \cdot q \cdot C_{Af}$

$$\boxed{\text{Tank}} \rightarrow F_{Am} - F_{A1} - k_1 C_{A1} V_1 - k_2 C_{A1} V_1 = 0$$

$$PV = nRT \quad C_{\text{tot}} = \frac{n}{V} = \frac{P}{RT}$$

$$C_{A1} = y_{A1} \cdot C_{\text{tot}}$$

$$y_{A1} = \frac{F_{A1}}{F_{A1} + F_{B1} + F_{C1}}$$

$$F_{Am} - F_{A1} - (k_1 + k_2) \cdot V_1 \cdot C_{\text{tot}} \cdot \frac{F_{A1}}{F_{A1} + F_{B1} + F_{C1}} = 0$$

$$F_{Am} - F_{A1} - \frac{\alpha \cdot F_{A1}}{F_{A1} + F_{B1} + F_{C1}} = 0 \quad (1)$$

$$-F_{B1} + 3k_1 C_{B1} \cdot V_1 = 0$$

$$-F_{B1} + 3k_1 \cdot \frac{F_{B1} \cdot C_{tot}}{F_{A1} + F_{B1} + F_{C1}} \cdot V_1 = 0 \quad (2)$$

$$-F_{C1} + 2k_2 C_{C1} \cdot V_1 = 0$$

$$-F_{C1} + 2k_2 \cdot C_{tot} \cdot \frac{F_{C1}}{F_{A1} + F_{B1} + F_{C1}} \cdot V_1 = 0 \quad (3)$$

$$1 + 2 + 3: \Rightarrow F_{A1}, F_{B1}, F_{C1}$$

Tank 2:

$$F_{Ain} = 0,49 \text{ CAF}$$

$$F_{Ain} - F_{A2} - \left((k_1 + k_2) \cdot V_2 \cdot \frac{C_{tot} \cdot F_{A2}}{F_{A2} + F_{B2} + F_{C2}} \right) = 0 \quad (4)$$

$$-F_{B2} + 3k_1 \cdot \frac{F_{B2} \cdot C_{tot}}{F_{A2} + F_{B2} + F_{C2}} \cdot V_2 = 0 \quad (5)$$

$$-F_{C2} + 2k_2 C_{tot} \cdot \frac{F_{C2}}{F_{A2} + F_{B2} + F_{C2}} \cdot V_2 = 0 \quad (6)$$

$$4, 5, 6 \Rightarrow F_{A2}, F_{B2}, F_{C2}$$

$$\text{MB: } F_{Aout} = F_{A1} + F_{A2}$$

$$F_{Cout} = F_{C1} + F_{C2}$$

$$S_C = \frac{F_{Cout}}{F_{Ain} - F_{Aout}} //$$



$$q \cdot c_A - q (c_A + dc_A) - k c_A dV = 0$$

$$-q dc_A - k c_A dV = 0$$

$$-q \int_{c_{Af}}^{c_A} \frac{dc_A}{c_A} = kV$$

$$V = 0,00031 \text{ m}^3$$

$$-q \ln \frac{c_A}{c_{Af}} = k \cdot V$$

$$k = -\frac{q}{V} \ln \frac{c_A}{c_{Af}} = -\frac{q}{V} \ln \frac{c_{Af}(1-x)}{c_{Af}} =$$

$$= 0,52 \text{ s}^{-1}$$

Segregationsmodellen;

$$\bar{X} = \frac{\int_0^{\infty} (1 - e^{-kt}) \cdot c(t) dt}{\int_0^{\infty} c(t) dt} = 0,94$$

\uparrow
 114,5

Tankseriemodel

$$\frac{\sigma^2}{t_m^2} = \frac{1}{n}$$

$$t_m = \int_0^{\infty} (t - \tau)^2 \cdot E(t) dt = 10,8$$

$$\frac{\sigma^2}{t_m^2} = \frac{10,8}{7,72^2}$$

$$n = \frac{t_m^2}{\sigma^2} = 5,58 \text{ dus valt}$$

6 tanks

$$4.1) \quad Sh = \frac{k_c d_p}{D_{AB}}$$

$$k_c = \frac{Sh \cdot D_{AB}}{d_p} = 2,0 \text{ m/s}$$

Tank 1: \uparrow Three mass-transport

$$0,3 \text{ g } C_{Af} - 0,3 \text{ g } C_{A1} - k_s \cdot C_{A1,5} \cdot V_1 = 0$$

$$k_c (C_{A6} - C_{A5}) = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{m/s}}}{k_m} C_{A5}$$

$$C_{A5} = \frac{k_c}{k_m + k_c} \cdot C_{A6}$$

$$0,3 \text{ g } C_{Af} - 0,3 \text{ g } C_{A1} - k_s \cdot \frac{k_c}{k_m + k_c} \cdot C_{A1} \cdot V_1 = 0$$

$$C_{A1} \left(0,3 \text{ g} + k_s \cdot \frac{k_c}{k_m + k_c} \cdot V_1 \right) = 0,3 \text{ g } C_{Af}$$

$$\Rightarrow \boxed{C_{A1} = 88,2 \text{ mol/m}^3}$$

Tank 2: One mass transport

$$\eta = \frac{3}{\theta} \left(\frac{1}{\tanh \theta} - \frac{1}{\theta} \right)$$

$$\theta = r_p \sqrt{\frac{k}{D_{eff}}} = 2,89$$

$$\Rightarrow \eta = 0,686$$

$$0,2 \text{ g} (C_{AF} - 0,2 \text{ g} C_{A2} - k_s \eta \cdot C_{A2} \cdot V_2) = 0$$

$$C_{A2} (0,2 \text{ g} + k_s \eta \cdot V_2) = 0,2 \text{ g} C_{AF}$$

$$\Rightarrow C_{A2} = 58,7 \text{ mol/m}^3$$

tank 3: både gttre och nre mass-transport

$$0,5 \text{ g} (C_{AF} - 0,5 \text{ g} C_{A3} - k_s C_{A3,5} \cdot \eta \cdot V_3) = 0$$

$$k_c (C_{A6} - C_{A5}) = \eta \cdot k_m C_{A5}$$

$$\Rightarrow C_{A5} = \frac{k_c}{k_m \cdot \eta + k_c} C_{A6}$$

$$C_{A3} \left(0,5 \text{ g} + k_s \eta \cdot \frac{k_c}{k_m \cdot \eta + k_c} \cdot V_3 \right) = 0,5 \text{ g} C_{AF}$$

$$\Rightarrow C_{A3} = 101 \text{ mol/m}^3$$

↑ anv. diameter for partled
I tank 3.

Blandnungspunkt:

$$0,3 \cdot q \cdot c_{A1} + 0,2 \cdot q \cdot c_{A2} + 0,5 \cdot q \cdot c_{A3} = q \cdot c_{A4}$$

$$c_{A4} = 88,7 \text{ mol/m}^3$$

$$c_{A4} = c_{Af} (1-x)$$

$$\Rightarrow x = 1 - \frac{c_{A4}}{c_{Af}} = \underline{\underline{0,70}}$$
