4. r – szybkość reakcji [mol·(m^3·s)$^{-1}$]
   $\frac{\mathrm{d}a_i}{\mathrm{d}\beta}$ – szybkość przetwarzania składnika i [s^{-1}]
   $\frac{\mathrm{d}c_i}{\mathrm{d}\beta}$ – szybkość przetwarzania składnika i [mol·(m^3·s)$^{-1}$]
5. k – stała szybkości reakcji, jednostka zależy od rzędowości reakcji
6. V – natężenie przepływu [m^3·s^{-1}]
7. u – prędkość liniowa strumienia [m·s^{-1}]
8. x – całkowity stopień przemiany substratu [mol/mol]
9. x_i – stopień przemiany substratu w produkt i [mol/mol]

Zadanie 1. Zamknięty reaktor zbiornikowy w warunkach zupełnego wymieszania reagentów

Założenia

Z-1.1. W zamkniętym reaktorze zbiornikowym o objętości czynnej υ_r [m^3] przy zupełnym wymieszaniu reagentów przebiega proces, w którym zachodzą dwie reakcje następcze R1 i R2 o równaniach stechiometrycznych:

(R1) $1\mathrm{A} \rightarrow 1\mathrm{P}$

(R2) $1\mathrm{P} \rightarrow 1\mathrm{B}$

Z-1.2. Reakcje R1 i R2 są nieodwracalnymi reakcjami I rzędu, których szybkość jest określona przez równania kinetyczne:

R1 $$r_1 = -\frac{\mathrm{d}c_\mathrm{A}}{\mathrm{d}\beta} = k_1 \cdot c_\mathrm{A} \qquad \left[\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{s}}\right] \tag{2.1}$$

R2 $$r_2 = -\frac{\mathrm{d}c_\mathrm{P}}{\mathrm{d}\beta} = k_2 \cdot c_\mathrm{P} \qquad \left[\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{s}}\right] \tag{2.2}$$

W warunkach procesu stała szybkości reakcji R1, $k_1 = 0{,}001\ \mathrm{s}^{-1}$.

Z-1.3. Stężenie początkowe substratu A $c_{\mathrm{A}0} = 1000\ \mathrm{mol/m^3}$. Całkowite stężenie reagentów A, P i B nie zmienia się w toku procesu, $c_\mathrm{A} + c_\mathrm{P} + c_\mathrm{B} = 1000\ \mathrm{mol/m^3}$.

Z-1.4. Proces zachodzi w stałej temperaturze.

Cel zadania

Należy wyznaczyć:

1. Zależności określające wpływ czasu przebywania β reagentów w stanie reakcji na ich udziały molowe: $a_\mathrm{A} = a_\mathrm{A}(\beta)$, $a_\mathrm{P} = a_\mathrm{P}(\beta)$, $a_\mathrm{B} = a_\mathrm{B}(\beta)$.

2. Zależności określające wpływ czasu przebywania β reagentów w stanie reakcji na szybkość przetwarzania substratu A $\left(\frac{\mathrm{d}a_{\mathrm{A}}}{\mathrm{d}\beta}\right)$, szybkość wytwarzania produktu B $\left(\frac{\mathrm{d}a_{\mathrm{B}}}{\mathrm{d}\beta}\right)$ i wypadkową szybkość wytwarzania produktu pośredniego P $\left(\frac{\mathrm{d}a_{\mathrm{P}}}{\mathrm{d}\beta}\right)$.

Rozwiązanie

Jeżeli reakcje następcze R1 i R2 prowadzi się w układzie jednorodnym w zamkniętym reaktorze zbiornikowym o objętości czynnej υ_{r}, to zgodnie z założeniem Z-1.3 całkowite stężenie molowe mieszaniny reagentów nie zmienia się w toku procesu. W celu wyprowadzenia zależności między stężeniem substratu A i czasem przebywania reagentów β, równanie (2.1) po odpowiednim przekształceniu całkuje się w zakresie wartości: stężenia od c_{A0} do c_{A} oraz czasu przebywania od 0 do β

$$\int_{c_{\mathrm{A0}}}^{c_{\mathrm{A}}} \frac{\mathrm{d}c_{\mathrm{A}}}{c_{\mathrm{A}}} = -k_1 \int_0^{\beta} \mathrm{d}\beta$$

W wyniku całkowania otrzymuje się zależność:

$$c_{\mathrm{A}} = c_{\mathrm{A0}} \cdot e^{-k_1 \cdot \beta} \qquad [\mathrm{mol/m^3}] \tag{2.3}$$

Przekształcając ten wynik, otrzymuje się zależność $a_{\mathrm{A}} = a_{\mathrm{A}}(\beta)$ między udziałem molowym substratu A w mieszaninie reagentów i czasem przebywania β:

$$a_{\mathrm{A}} = \frac{c_{\mathrm{A}}}{c_{\mathrm{A0}}} = e^{-k_1 \cdot \beta} \qquad [\mathrm{mol/mol}] \tag{2.4}$$

Z równań (2.1), (2.3) i (2.4) wynikają zależności określające wpływ czasu przebywania β na szybkość zmian stężenia (r_{A}) i udziału molowego substratu A w toku procesu:

$$r_{\mathrm{A}} = \frac{\mathrm{d}c_{\mathrm{A}}}{\mathrm{d}\beta} = -k_1 \cdot c_{\mathrm{A0}} \cdot e^{-k_1 \cdot \beta} \tag{2.5}$$

oraz

$$\frac{\mathrm{d}a_{\mathrm{A}}}{\mathrm{d}\beta} = -k_1 \cdot e^{-k_1 \cdot \beta} \qquad [\mathrm{s^{-1}}] \tag{2.6}$$