

## KE-40.1800 Ideaalireaktorit

Tentti 21.5.2013 klo 8-12.

Tentissä saa olla mukana kirjallisuutta, kuten luentomoniste ja kurssikirja. Tentissä ei saa olla mukana mitään laskuharjoitusmateriaalia, kotilaskuja, kotilaskujen ratkaisuja tai muita valmiita laskuratkaisuja.

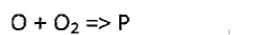
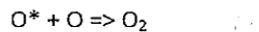
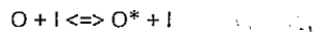
Laskimet sallittu.

Vastaa kaikkiin viiteen tehtävään. 6 pistettä / tehtävä

**Tehtävä 1.** Oravien määrän arveltiin vähenevän eräällä metsäalueella. Tutkittaessa havaittiin, että oravat todella vähenevät ja että niiden kulumisnopeus noudatti seuraavaa nopeusyhtälöä:

$$r = \frac{-dC}{dt} = \frac{k[O]^2[I]}{[I] + k'[O]}$$

Syyn pääteltiin olevan oravien suvunjatkamiskäyttäytymisessä. Tämän arveltiin menevän seuraavan mekanismin mukaan:



Missä:

I on inerttiorava, joka saa yhden oravan aktiiviseksi muttei saa suoritettua reaktiota loppuun.

O<sub>2</sub> on aktiivinen välivaihe, jossa aktiivinen orava ja naapurireviirin yksilö ovat muodostaneet dimeerin.

Viimeisessä vaiheessa syntynyt dimeeri muodostaa poikasen kuroutumalla yhteen uuden oravan kanssa.

Todista, että aikuiset oravat todella kuluvat ehdotetulla mekanismilla.

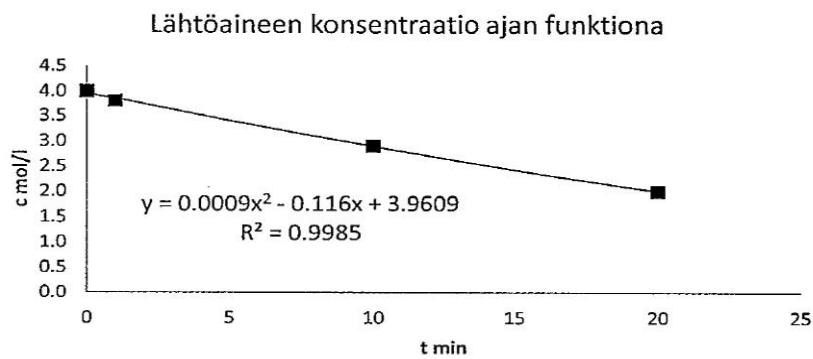
Huom! Vain ensimmäinen reaktio on reversiibeli ja O\* sekä O<sub>2</sub> ovat aktiivisia reaktion välivaiheita.

**Tehtävä 2.** Lähtöaine A hajosi alkeisreaktiossa tuotteiksi. Taulukossa 1 ja kuvassa 1 on esitetty lähtöaineen A konsentraatio ajan funktiona.

Määritä reaktio kertaluku, reaktionopeusvakio ja reaktionopeusvakion yksikkö.

Taulukko 1. Lähtöaineen konsentraatio eri reaktioajanhetkillä.

reaktioaika min	lähtöaineen konsentraatio mol/l
0	4.0
1	3.8
10	2.9
20	2.0



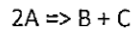
Kuva 1. Lähtöaineen konsentraatio ajan funktiona ja tätä vastaava yhtälön sovite.

**Tehtävä 3.** Lähtöaineesta A tuotetaan panosreaktorissa nestefaasissa tuotteita B ja C. Lähtöaineen konsentraatio reaktorissa reaktion alussa on  $4 \text{ kmol/m}^3$ . Reaktoria käytetään 8 tuntia. Kuinka suuri A:n konversio saavutetaan tässä ajassa?

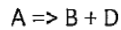
Reaktioyhtälö:  $2 \text{ A} \rightarrow \text{B} + \text{C}$

Kyseisen alkeisreaktion reaktionopeusvakion arvo käytetyissä olosuhteissa on  $k = 3,05 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3 \text{ kmol}^{-1} \text{ h}^{-1}$ . Reaktorin toimii vakio- $\text{lämpötilassa}$  ja vakio- $\text{paineessa}$ .

**Tehtävä 4.** On kaksi kilpailevaa teoriaa siitä, kuinka komponentti A hajoaa kaasufaasissa. Näiden teorioiden mukaan joko:



tai



Reaktiot voidaan olettaa irreversibilbeleiksi alkeisreaktioiksi. Tapahtuvasta reaktiosta tiedetään, että sen nopeusvakion arvo on  $0,710 \text{ min}^{-1}$ . Kumpi teoria on oikea, kun isotermisesti ja vakioaineessa suoritettussa kokeessa havaittiin että 90 % konversion saavutettiin  $200 \text{ dm}^3$  CSTR-reaktorissa. A:n syöttö on  $2,5 \text{ mol/min}$ , sen paine on 10 bar ja lämpötila  $127 \text{ }^\circ\text{C}$ .

**Tehtävä 5.** Perustele tarvittaessa vastauksesi.

- Mikä on alkeisreaktio?
- Kaasufaasissa tapahtuvassa reaktiossa, jossa tilavuudenmuutos tulee huomioida (molekyyylimäärä pienenee), liuottimen lisääminen pienentää tasapainovakion arvoa. Onko väite oikein vai väärin?
- Mikä on 1. kertalukua olevan alkeisreaktion reaktionopeusvakion k yksikkö?
- Monettako kertalukua alkeisreaktio  $2A + B + 3C \rightarrow 4D + 2E$  on lähtöaineen C suhteen?
- Etyliiasetaattia tuotetaan etanolista ja etikkahaposta.  
 $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{CH}_3\text{COOH} \rightarrow \text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$   
 Lähtöaineena oli 400 g etanolia. Reaktion jälkeen etanolia oli jäljellä 100 g ja tuotteena saatiin 200 g etyliiasetaattia. Mikä oli etyliiasetaatin selektiivisyys?
- Reaktorissa tapahtuu vain yhtä endotermistä reaktiota. Jos lämpötilaa nostetaan, niin mitä tapahtuu reaktion saannolle?

1. kerta

$$V = \frac{\dot{n}_{A0} - \dot{n}_A}{k C_{A0} (1-x)}$$

$$\frac{\dot{n}_i - \dot{n}_{i0}}{V} = r_i \quad n = \frac{m}{M}$$

$$m^3 \text{ kmol}^{-1} \text{ h}^{-1}$$

$$C_A = C_{A0} (1-x)$$