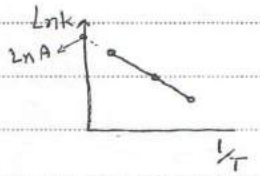
Subject:
Year. Month. Date. ( )

نمودار آرنیوس:



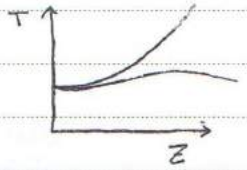
$$Lnk = LnA - \frac{E}{R}\left(\frac{1}{T}\right)$$

از نمودار می فهمیم:

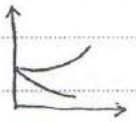
هرچه قدر دما بیشتر باشد، سرعت واکنش بیشتر می شود.

* اگر واکنش exothermic (گرماده) باشد، یعنی در اثر واکنش گرمایی تولید شود، باید این گرما را از محیط خارج کنیم.

اگر واکنش exothermic باشد، اما آدیاباتیک باشد نمی توانیم گرما را از محیط خارج کنیم، دما بالا تر می رود و سرعت واکنش بالاتر می رود و اگر ما واکنش را کنترل نکنیم، احتمال انفجار به وجود می آید. درنتیجه باید در بعضی مقطعها از شیر کنترل استفاده کنیم یا آب سرد را وارد بعضی قسمت ها کنیم تا دما را کاهش دهیم. ابتدا گرما بر آب سرد می چربد اما در نهایت آب سرد، دما را پایین می آورد.



اگر واکنش endothermic (گرماگیر) باشد، دما کاهش می یابد و سرعت واکنش کاهش می یابد. درنتیجه باید به سیستم گرما بدهیم اما نباید اینقدر گرما بدهیم که دما از دست ما خارج شود و دما به طور کنترل نشده زیاد شود.



* در این درس ما دما را ثابت در نظر می گیریم و درنتیجه نیازی به موازنه ی انرژی نداریم. (یعنی شرایط ایزوترمال)

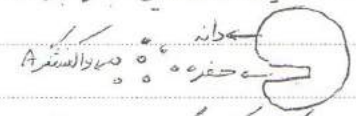
* برای اینکه دما را ثابت نگه داریم، از چند راکتور استفاده می کنند و بین راکتورها از خنک کن بین مرحله ای استفاده می کنیم.

پس در راکتورهای ایزوترمال، نه موازنه ی انرژی نیاز نداریم.

* راکتورهای همگن و ناهمگن چه فرقی دارند؟

همگن ← تک فازی و ناهمگن ← چند فازی

* یکی از راکتورهایی که در صنعت خیلی استفاده می‌شود، راکتورهای بستر ثابت هستند. در این راکتورها یک بستری از کاتالیست وجود دارد که دانه‌های کاتالیستی روی آن وجود دارد. سیال از روی این بستر عبور می‌کند. یک دانه‌ی کاتالیستی را رسم می‌کنیم. روی این دانه‌ها یک حفره وجود دارد.



واکنشگرهای A وجود دارند. دهن حفره باید به اندازه‌ای باز باشد که واکنشگرها بتوانند به آنها وارد شوند. پس در ابتدا یک انتقال جرم برون دانه‌ای داریم. در دهنه‌ی حفره غلظت A زیاد است و در انتهای حفره غلظت A کم است، در نتیجه یک گرادیان غلظت به وجود می‌آید که شرایط نفوذ به داخل دانه را فراهم می‌کند. پس واکنشگر A به داخل دانه نفوذ می‌کند. پس از نفوذ واکنشگر A به داخل دانه، واکنشگرهای A روی سطح کاتالیست می‌نشینند.

فرض می‌کنیم مکان‌های فعال کاتالیستی هم روی سطح حفره وجود دارند. پس واکنشگر A توسط این مکان‌ها جذب کاتالیست می‌شود. بعد از جذب A، یک واکنش سطحی رخ می‌دهد و به B تبدیل می‌شود (محصولات B) و بعد در طول سطح دفع می‌شوند به سطح خارجی دانه نفوذ پیدا می‌کنند و بعد از سطح خارجی دانه به BULK سیال نفوذ پیدا می‌کنند.

پس هفت مرحله داریم: ۱) انتقال جرم برون دانه‌ای ۲) نفوذ واکنشگر A به داخل دانه از طریق حفره

۳) نشستن واکنشگر A روی سطح کاتالیست ۴) جذب واکنشگر A توسط مکان‌های فعال کاتالیستی

۵) واکنش سطحی A و تبدیل شدن به B ۶) نفوذ محصول B به خارج از دانه از طریق حفره

۷) نفوذ B به BULK سیال

از بین این مراحل، یک مرحله تعیین‌کننده است که مرحله‌ی تعیین‌کننده‌ی واکنش همان مرحله‌ی محدودکننده‌ی سرعت واکنش است. حالا هر کدام از این مراحل در واکنش‌های مختلف ممکن است نقش مرحله‌ی تعیین‌کننده را داشته باشند.

* نکته: اگر کاتالیست مدتی استفاده شود، حفره‌ها بسته می‌شوند و یا کاتالیست غیرقابل استفاده می‌شود و یا اگر قابل استفاده باشد، راندمان خیلی پایین می‌آید.

* در ادامه‌ی مطلب بالا می‌توان مثال دیگری زد:

یک سری از راکتورها هستند با نام Bubble Column یا ستون‌های حبابی که مایع از بالا وارد

Subject:
Year. Month. Date. ( )

ستون می شود و گاز به صورت حباب هایی از پایین وارد ستون می شود و واکنش در فاز مایع صورت می گیرد.
واکنشگر A از حباب های گاز به داخل مایع نفوذ می کند و بعد در توده ی مایع (Bulk مایع) واکنش انجام می شود. اگر واکنش خیلی سریع انجام شود، در این صورت، سرعت واکنش احتمالاً به شیمی واکنش بر حسب نحو اهد داشت و آنچه که تعیین کننده است (در حدی محدود کننده) انتقال جرم از فاز گاز به فاز پیوسته ی مایع خواهد بود.

* راکتور ایده آل یعنی چه؟

در این درس با ۴ نوع راکتور آشنا می شویم:

1) Batch — راکتورهای ناپیوسته ی
2) Plug Flow Reactor — راکتورهای لوله ای (PFR)
3) Continuos Stired tank Reactor — راکتورهای بشکه ای (CSTR)
4) Recycle — راکتورهای برگشتی

① Batch: (راکتور ایده آل)

فرض می کنیم یک واکنش گازی انجام می شود و دما ثابت است و حجم راکتور ثابت است، داریم: $PV = nRT$
(یک مول A وقتی تبدیل به یک مول B تولید شده پس n ثابت است.)

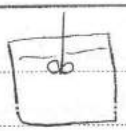
برای واکنش $A \rightarrow B$ ⇐ بنابر فرضیات بالا و رابطه، فشار ثابت می ماند.

برای واکنش $A \rightarrow 2B$ ⇐ " " " " چون n زیاد می شود، P زیاد می شود.

برای واکنش $2A \rightarrow B$ ⇐ " " " " چون n کاهش می یابد، P کم می شود.

نکته ی راکتورهای نوع اول این است که ورودی و خروجی ندارد و تعداد مول های واکنش (حضور مواد) داخل راکتور با زمان تغییر می کند و همزمانی که در این راکتور وجود دارد باعث می شود اختلاط کامل در داخل راکتور انجام شود و در نتیجه مواد داخل راکتور با زمان تغییر نمی کند. مثلاً غلظت در همه جای یک

Subject:
Year. Month. Date. ( )

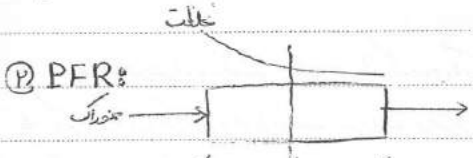


زمان هشخص ثابت است و فقط جمعیات با تغییر زمان، تغییر می‌کند (معادلات دیفراسیلی داریم)

Batch

راکتور ناپیوسته یا تبدیل واکنش: این نوع راکتورها، به زمان اقامت خوراک بستگی دارد و زمان اقامت خوراک، خود به ۱) حجم راکتور و ۲) شدت جریان خوراک بستگی دارد.

② PFR:



* در این نوع راکتورها، غلظت کم می‌شود. درنتیجه جمعیات در این نوع راکتورها به مکان بستگی دارد اما به زمان بستگی ندارد. (معادلات دیفراسیلی داریم)

* این نوع راکتورها جزء راکتورهای پیوسته به حساب می‌آید.

* اگر قطر این راکتورها زیاد باشد علاوه بر اینکه غلظت در راستای محور تغییر می‌کند، غلظت در راستای شعاع نیز تغییر خواهد کرد که البته در این درس ما راکتورها را در حالت ایده‌آل بررسی می‌کنیم. در حالت ایده‌آل اختلاط در جهت شعاع کامل است و درنتیجه جمعیات در راستای شعاع به مکان بستگی ندارند اما در جهت محور جمع کنونده اختلاطی انجام نمی‌شود، درنتیجه جمعیات در راستای محور به مکان بستگی دارند.

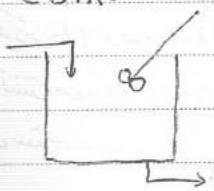
* از این جا به بعد با معادلاتی سروکار خواهیم داشت و می‌خواهیم موازنه بنویسیم.

تجمع = مصرف − تولید + خروجی − ورودی

* برای واکنش $A \rightarrow B$، کافی است فقط برای A، موازنه بنویسیم. (یعنی فقط برای واکنشگر)

* برای واکنش $A + B \rightarrow C$ برای کدام واکنشگر موازنه را می‌نویسیم؟ باید ببینیم کدام (واکنشگر محدودکننده) است و برای آن می‌نویسیم.

③ CSTR:



* چون همزن داریم، تغییر جمعیات در داخل راکتور به مکان بستگی ندارد.

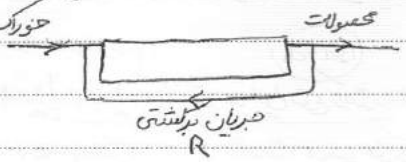
* و چون هم ورودی داریم و هم خروجی داریم، یعنی سیستم پیوسته است درنتیجه تغییر جمعیات در داخل راکتور به زمان بستگی ندارد.

(معادلات جبری داریم.)

Subject:
Year: Month: Date: ( )

* برای راکتورهایی که با همزن نمی‌توانیم اختلاط کامل داشته باشیم (یعنی اگر کجا خواهیم برای راکتور اختلاط کامل داشته باشیم، از یک راکتور لوله‌ای با یک جریان برگشتی استفاده می‌کنیم (البته در راکتورهایی که با همزن اختلاط کامل ایجاد می‌کنیم.)

۴) Recycles



* در واقع در جریان برگشتی، یک جریان که روی آن تبدیل صورت گرفته به همراه خوراک تبدیل نشده به داخل راکتور وارد می‌کنیم

* اگر جریان برگشتی صفر باشد در واقع راکتور PFR را خواهیم داشت. فقط ورودی و خروجی داریم $R=0 \rightarrow PFR$

* اگر جریان برگشتی بی‌نهایت باشد، تفاوت‌هایی ورودی و خروجی خیلی بهم نزدیک می‌شوند و در نتیجه رفتار آنها مانند راکتورهای CSTR می‌شود. $R=\infty \rightarrow CSTR$

داریم حجم اختلاط کامل داریم

* * * * *

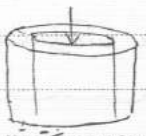
کاتالیست‌ها:

برای راکتورها از کاتالیست‌ها استفاده می‌کنیم که به مرور زمان فعالیت خود را از دست می‌دهند. این به مرور زمان، می‌تواند از چند ثانیه تا چند سال باشد. می‌توانیم به مرور زمان دما را افزایش دهیم تا کاهش فعالیت را جبران کند. البته وقتی دما زیاد شود، غیرفعال شدن هم سریعتر می‌شود و در نهایت باید کاتالیست را تعویض یا احیاء کنیم.

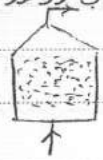
نکته: راکتور آرمانی ← راکتور ایده‌آل

راکتور بهم زده ← راکتور ایزوترمال

* راکتورهای جریان شعاعی: از بالا به سمت مرکز استوانه، واکنشگر وارد می‌شود. کاتالیست روی بدنه‌ی استوانه وجود دارد و واکنش در جهت شعاع به سمت دیواره انجام می‌شود.



* راکتورهای بستر سیال: در داخل ستون کاتالیست به صورت بستر سیال شده (توده‌ی روی هم ریخته شده‌ی کاتالیزگرها) وجود دارد. واکنشگر از مناقذ بین آنها عبور کرده و به طور همزمان به دلیل تماس با کاتالیست وارد واکنش می‌شود. در نهایت در خروجی مقداری از ذرات کاتالیستی، همراه جریان خروجی از راکتور خارج می‌شود.



PqPCO

Subject:
Year. Month. Date. ( )

سوال: یک راکتور داریم که درآن اختلاط نداریم یک رنگ را به ورودی وارد می‌کنم (مثلاً محلول‌های رنگی) آیا راکتور کاملاً ایده‌آل باقی می‌ماند یا خیر؟

(غرض ما این است زمان ماندن تزریق معرف به خوراک ورودی به راکتور باشد.)

* قبلاً گفتیم در راکتور ایده‌آل فقط اختلاط محوری داریم.

* by pass: یعنی بخشی از جریان بدون اینکه وارد واکنش شود به جریان خروجی برود.

* * * * *

* خلاصه‌ی مطالبی که خواهیم خواند:

Ideal Isothermal Homegneaus Reactor:

1) Batch
2) PFR
3) CSTR
4) Recycle

این ۴ نوع راکتور را در سه حالت خواهیم خواند

1) Singl Reaction & Multple Reactor
2) Multple Reaction & Single Reactor
3) Multple Reaction & Multple Reactor

نکته: Single Reaction به ندرت پیش می‌آید.

نکته: اگر چند تا راکتور داشته باشیم، آنها را چگونه بهم وصل کنیم؟

مثلاً اگر سری باشند، راکتورها به چه ترتیبی باید قرار بگیرند؟

یا اگر موازی باشند، چه مقدار خوراک به کدام واحد برود؟ (در اینجا بحث مدل‌سازی کردن آسان انجام می‌شود اما جداسازی سخت صورت می‌گیرد، پیش می‌آید)

نکته: سوال اصلی این است که چه زمانی max غلظت مطلوب را خواهیم داشت؟ (هدف ما)

نکته: نمودار غلظت برحسب زمان $C \rightarrow B \rightarrow A$ به شکل زیر است: