

## СТЕХИОМЕТРИЯ. ПОКАЗАТЕЛИ ЭФФЕКТИВНОСТИ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА (ХТП)

Вещества вступают во взаимодействие в определённом соотношении. *Стехиометрическое уравнение* определяет качественные и количественные изменения состава реакционной массы



Для расчёта количеств веществ, прореагировавших или образовавшихся в результате химической реакции, используется *основное стехиометрическое соотношение*

$$\frac{\Delta N_A}{\nu_A} = \frac{\Delta N_B}{\nu_B} = \frac{\Delta N_R}{\nu_R} = \frac{\Delta N_S}{\nu_S}$$

При этом, если при расчёте пренебрегается изменение объёма реакционной массы, то вместо кол-ва вещества используют мольную концентрацию

Для исходных соединений  $\Delta N_i = N_{i0} - N_i > 0$

Для продуктов реакции  $\Delta N_i = N_{i0} - N_i < 0$

### *Степень превращения вещества*

$$x_A = \frac{\text{кол. — во прореагировавшего в — ва } A}{\text{исходное кол. — во вещества } A}$$

$$x_A = \frac{\Delta N_A}{N_{A0}} = \frac{\Delta C_A}{C_{A0}} = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}$$

необратимые процессы  $x_A \in [0 ; 1]$

обратимые процессы  $x_A \in [0 ; x_A^*]$

Прореагировало вещества A:  $\Delta C_A = C_{A0} \cdot x_A$

Осталось вещества A:  $C_A = C_{A0} \cdot (1 - x_A)$

### *Выход продукта*

$$E_R = \frac{\text{кол. — во полученного продукта } R \text{ по реакции}}{\text{максимально возможная концентрация продукта } R}$$

необратимые процессы

$$E_R = \frac{C_R}{C_R^{\max}} = \frac{\Delta C_{A \rightarrow R}}{C_{A0}}$$

обратимые процессы

$$E_R^* = \frac{C_R}{C_R^*} = \frac{\Delta C_{A \rightarrow R}}{C_{A0} - C_A^*}$$

### *Интегральная селективность*

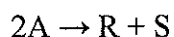
$$S_R = \frac{\text{кол. — во исх. соединения } A, \text{ превратившегося в продукт } R}{\text{всё кол. — во прореагировавшего исх. соединения } A}$$

$$S_R = \frac{\Delta C_{A \rightarrow R}}{\Delta C_A} \text{ или при единичн. стехиом. } S_R = \frac{C_R}{C_R + C_S}$$

Существует формула, *объединяющая все вышеописанные показатели эффективности ХТП*:

$$E_R = x_A \cdot S_R$$

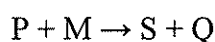
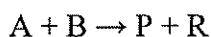
1. Химический процесс описывается следующим уравнением реакции:



Количество вещества A в начале процесса  $N_{A0} = 24$  моль. В результате химического процесса образовалось вещества R  $N_R = 8$  моль. Определить количество вещества A и S ( $N_A$ ,  $N_S$ ) по завершении процесса, степень превращения вещества A ( $x_A$ ) и выход продукта R ( $E_R$ ).

**$N_A = 8$  моль;  $N_S = 8$  моль;  $x_A = 0,67$ ;  $E_R = 0,67$ .**

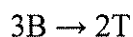
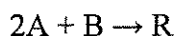
2. Химический процесс описывается следующими уравнениями реакции:



По завершении процесса веществ P и S образовалось  $N_P = 12$  моль,  $N_S = 4$  моль. Для проведения процесса было взято  $N_{A0} = N_{B0} = 20$  моль. Определить степень превращения вещества A ( $x_A$ ) и селективность по продукту P ( $S_P$ ).

**$x_A = 0,8$ ;  $S_P = 0,75$ .**

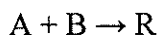
3. Химический процесс описывается следующими уравнениями реакции:



Начальные концентрации веществ A и B  $C_{A0} = 0,3$  моль/л,  $C_{B0} = 0,2$  моль/л. По завершении процесса концентрации веществ B, S, T составили соответственно  $C_B = 0,016$  моль/л,  $C_S = 0,011$  моль/л,  $C_T = 0,03$  моль/л. Определить интегральную селективность по веществу R относительно исходного соединения B ( $S_R(B)$ ).

**$S_R(B) = 0,58$ .**

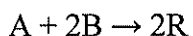
4. Химический процесс описывается следующими уравнениями реакции:



Начальные концентрации веществ A и B  $C_{A0} = 2$  моль/л,  $C_{B0} = 1,7$  моль/л. По завершении процесса концентрации веществ A, B, T, D составили соответственно  $C_A = 0,1$  моль/л,  $C_B = 0,5$  моль/л,  $C_T = 0,15$  моль/л,  $C_D = 0,05$  моль/л. Определить концентрации веществ R и S ( $C_R$ ,  $C_S$ ).

**$C_R = 1,05$  моль/л;  $C_S = 0,25$  моль/л.**

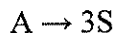
5. Химический процесс описывается следующим уравнением реакции:



Степень превращения вещества A составляет  $x_A = 0,45$ . Определить выход продукта R по веществу A ( $E_R(A)$ ) и степень превращения B ( $x_B$ ) для случаев: 1) вещества A и B взяты в стехиометрическом соотношении,  $C_{A0} = 1$  моль/л,  $C_{B0} = 2$  моль/л; 2)  $C_{A0} = C_{B0} = 1$  моль/л.

**$E_R(A) = 0,45$ ;  $x_{B1} = 0,45$ ;  $x_{B2} = 0,9$ .**

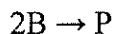
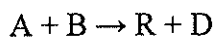
6. Химический процесс описывается следующими уравнениями реакции:



По завершении процесса концентрации веществ A, R и S составили соответственно  $C_A = 1$  моль/л,  $C_R = 2$  моль/л и  $C_S = 2$  моль/л. Определить степень превращения вещества A ( $x_A$ ), выход продукта R ( $E_R$ ) и селективность процесса по продукту R ( $S_R$ ).

$$x_A = 0,82; E_R = 0,71; S_R = 0,86.$$

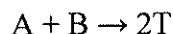
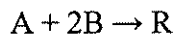
7. Химический процесс описывается следующими уравнениями реакции:



Начальные концентрации веществ A и B  $C_{A0} = 0,1$  моль/л,  $C_{B0} = 0,3$  моль/л. По завершении процесса концентрации веществ P, S и D составили соответственно  $C_P = 0,028$  моль/л,  $C_S = 0,012$  моль/л,  $C_D = 0,034$  моль/л. Определить концентрацию продукта R ( $C_R$ ), степень превращения вещества B ( $x_B$ ) и выход продукта P ( $E_P$ ).

$$C_R = 0,01 \text{ моль/л}; x_B = 0,30; E_P = 0,19.$$

8. Химический процесс описывается следующими уравнениями реакции:



Начальная концентрация вещества A  $C_{A0} = 2$  моль/л. По завершении процесса концентрации веществ A, B, R, S составили соответственно  $C_A = 1,2$  моль/л,  $C_B = 2,3$  моль/л,  $C_R = 0,2$  моль/л,  $C_S = 0,4$  моль/л. Определить начальную концентрацию вещества B ( $C_{B0}$ ) и концентрацию продукта T ( $C_T$ ).

$$C_{B0} = 4,1 \text{ моль/л}; C_T = 0,4 \text{ моль/л}.$$

9\*. Химический процесс описывается следующими уравнениями реакции:



Начальная концентрация вещества A  $C_{A0} = 1$  моль/л. По завершении процесса концентрации веществ A, R, S, T составили соответственно  $C_A = 0,44$  моль/л,  $C_R = 0,05$  моль/л,  $C_S = 0,33$  моль/л,  $C_T = 0,14$  моль/л. Вещество B прореагировало полностью. Определить начальную концентрацию вещества B ( $C_{B0}$ ) и концентрацию продукта D ( $C_D$ ).

$$C_{B0} = 0,94 \text{ моль/л}; C_D = 0,18 \text{ моль/л}.$$

## ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА

Изучает обратимые химические процессы. Известно, что

$$\Delta G_{T,p} = \Delta G_T^0 + RT \cdot \ln K_p$$

Если величина  $\Delta G_{T,p} < 0$ , то процесс идёт самопроизвольно в прямом направлении;  $> 0$  – процесс в прямом направлении не идёт, а протекает в обратном направлении;  $= 0$  – рассматриваемая система находится в термодинамическом равновесии.

Из **изотермы Вант-Гоффа** следует, что термодинамическую константу равновесия  $K_p$  можно определить:

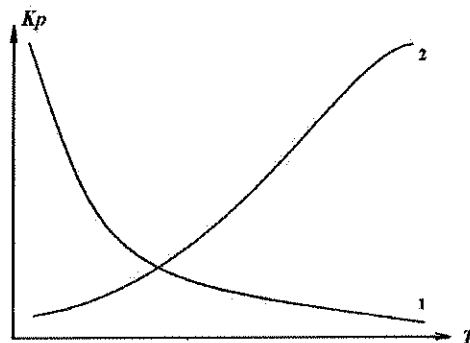
$$K_p = \exp \left( \frac{-\Delta G_T^0}{RT} \right), \Delta G_T^0 = \Delta H_T^0 - T \cdot \Delta S_T^0$$

Константа равновесия  $K_p$  является функцией температуры, эту зависимость описывает **изобара Вант-Гоффа**:

$$\frac{d \ln K_p}{dT} = \frac{\Delta H_T^0}{RT^2}$$

1 –  $\Delta H_T^0 < 0$  ( $Q_{x,p} > 0$ ), экзотермич. р-ция

2 –  $\Delta H_T^0 > 0$  ( $Q_{x,p} < 0$ ), эндотермич. р-ция



**Связь между константами  $K_p$  и  $K_c$ :**  $K_p = K_c \cdot (RT)^{\Delta \nu}$ , где  $\Delta \nu$  – разница между числом молей газообразных продуктов и числом молей газообразных исходных веществ.

Если рассматривается термодинамика **жидкофазных процессов**, то  $K_p = K_c$

Концентрационную константу равновесия  $K_c$  можно определить исходя из понятия «равновесие»:

$$K_c = \frac{k_1}{k_{-1}},$$

где  $k_1$  – константа скорости прямой реакции,  $k_{-1}$  – константа скорости обратной реакции.

Исходя из того, что все рассматриваемые процессы являются жидкофазными, получается:

$$v_A A \leftrightarrow v_R R$$

$$K_p = K_c = \frac{C_R^{*v_R}}{C_A^{*v_A}} = \frac{[\frac{v_R}{v_A} \cdot C_{A0} \cdot x_A^*]^{v_R}}{[C_{A0} \cdot (1 - x_A^*)]^{v_A}}$$

### Принцип Ле-Шателье – Брауна

1. Повышение  $T$  в экзотермических процессах смещает равновесие  $\leftarrow$ , в эндо-  $\rightarrow$
2. Повышение  $P$  смещает равновесие в сторону **меньших объёмов** (т.е. в сторону меньших молей газообразных исходных в-в/продуктов реакции)
3. Повышение концентрации исходных веществ / вывод из системы продуктов реакции смещает равновесие  $\rightarrow$
4. Добавление в систему газообразного инерта эквивалентно **понижению давления** в системе

**Катализатор никакого влияния на равновесие не оказывает!**

1. Жидкофазный химический процесс описывается уравнением реакции  $A \leftrightarrow 2R$ . Концентрационная константа равновесия  $K_C = 1,33$  моль/л, начальная концентрация вещества А  $C_{A0} = 2$  моль/л. Известно, что достигаемая степень превращения  $x_A$  равна  $\frac{3}{4}$  от величины равновесной степени превращения  $x_A^*$ . Определить степень превращения вещества А ( $x_A$ ) и равновесный выход продукта R ( $E_R^*$ ).

$$x_A = 0,25; E_R^* = 0,75.$$

2. Жидкофазный химический процесс описывается уравнением реакции  $A \leftrightarrow R$ . Температура процесса  $T_1 = 298$  К, энтальпия реакции  $\Delta H^0 = -26000$  Дж/моль и не зависит от температуры. Энтропия процесса  $\Delta S^0$  также не зависит от температуры. Известно, что константа равновесия  $K_{p\ 298} = 17,5$ . Определить, во сколько увеличится/уменьшится равновесная степень превращения, если температуру процесса поднять до  $T_2 = 348$  К.

$$x_{A\ 348}^* < x_{A\ 298}^* \text{ в } 1,19 \text{ раз.}$$

3. Жидкофазный химический процесс описывается уравнением реакции  $A + B \leftrightarrow 2R$ . Температура процесса  $T = 500$  К. Обе реакции (прямая и обратная) – второго порядка. Начальные концентрации веществ А и В  $C_{A0} = 2$  моль/л,  $C_{B0} = 2,5$  моль/л. Определить равновесный состав реакционной смеси ( $C_A^*$ ,  $C_B^*$ ,  $C_R^*$ ), если известно, что константы скорости прямой и обратной реакции зависят от температуры по формулам:

$$k_1 = 6,2 \cdot 10^4 \exp\left(\frac{-27600}{RT}\right), \frac{\text{л}}{\text{моль} \cdot \text{с}}$$

$$k_{-1} = 7,5 \cdot 10^5 \exp\left(\frac{-32000}{RT}\right), \frac{\text{л}}{\text{моль} \cdot \text{с}}.$$

$$C_A^* = 1,56 \text{ моль/л; } C_B^* = 2,06 \text{ моль/л; } C_R^* = 0,88 \text{ моль/л.}$$

4. Жидкофазный химический процесс описывается уравнением реакции  $A + B \leftrightarrow R + S$ . Температура процесса  $T = 330$  К, энтальпия реакции  $\Delta H_{330}^0 = -59500$  кДж/кмоль, энтропия процесса  $\Delta S_{330}^0 = -175,5$  кДж/(кмоль·К). Начальные концентрации веществ А и В равны и составляют  $C_{A0} = C_{B0} = 1,5$  моль/л. Определить равновесный состав реакционной смеси ( $C_A^*$ ,  $C_B^*$ ,  $C_R^*$ ,  $C_S^*$ ).

$$C_R^* = C_S^* = 0,86 \text{ моль/л; } C_A^* = C_B^* = 0,65 \text{ моль/л.}$$

5. Жидкофазный химический процесс описывается уравнением реакции  $A + B \leftrightarrow 2R$ . Температура процесса  $T = 298$  К, энтальпия реакции  $\Delta H_{298}^0 = -30,5$  кДж/моль, энтропия процесса  $\Delta S_{298}^0 = -80$  кДж/(кмоль·К). Сравнить равновесные степени превращения ( $x_{A1}^*$ ,  $x_{A2}^*$ ), если: 1)  $C_{A0} / C_{B0} = 0,5$ ; 2)  $C_{A0} / C_{B0} = 0,25$ .

$$x_{A1}^* < x_{A2}^* \quad (x_{A1}^* / x_{A2}^* = 0,91).$$

6. Жидкофазный химический процесс описывается уравнением реакции  $A + 2B \leftrightarrow 3R$ . Температура процесса  $T = 373$  К, энергия Гиббса  $\Delta G_{373}^0 = -11,2$  кДж/моль. Начальные концентрации веществ А и В  $C_{A0} = 1$  моль/л,  $C_{B0} = 2$  моль/л. Определить равновесную степень превращения вещества А ( $x_A^*$ ) равновесный состав реакционной смеси ( $C_A^*$ ,  $C_B^*$ ,  $C_R^*$ ).

$$x_A^* = 0,64; C_A^* = 0,36 \text{ моль/л; } C_B^* = 0,72 \text{ моль/л; } C_R^* = 1,92 \text{ моль/л.}$$

## ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА

Скорость элементарной стадии химического процесса:

$$r = k \cdot C_i^n$$

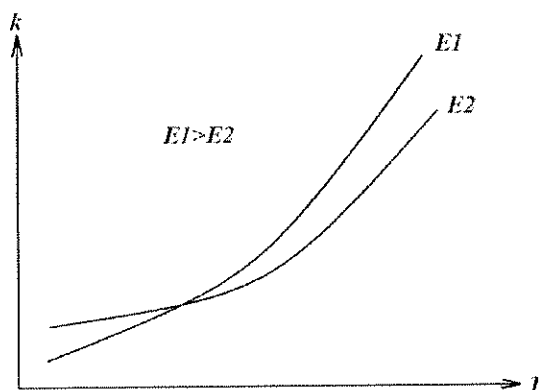
$k$  – константа скорости химической реакции

$C$  – текущая концентрация исх. соединений

$n$  – порядок реакции (элементарной стадии)

Константа скорости реакции является функцией температуры, эту зависимость описывает уравнение Аррениуса:

$$k = A \cdot \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right)$$



Скорость реакции по компоненту  $i$ :

$$w_i = \frac{\text{кол. во превращенного в } i}{\text{ед. реакционного объема} \cdot \text{ед. времени}} = \frac{dC_i}{dt} \quad \left[ \frac{\text{моль}}{\text{л} \cdot \text{с}} \right]$$

### Параллельные и последовательные реакции



$$C_A = C_{A0} \cdot \exp(-(k_1 + k_2) \cdot t)$$

$$C_A = C_{A0} \cdot \exp(-k_1 \cdot t)$$

$$C_R = C_{A0} \cdot \frac{k_1}{k_1 + k_2} \cdot (1 - \exp(-(k_1 + k_2) \cdot t))$$

$$C_R = C_{A0} \cdot \frac{k_1}{k_2 - k_1} \cdot (e^{(-k_1 \cdot t)} - e^{(-k_2 \cdot t)})$$

$$C_S = C_{A0} \cdot \frac{k_2}{k_1 + k_2} \cdot (1 - \exp(-(k_1 + k_2) \cdot t))$$

$$C_S = (C_{A0} - C_A - C_R)$$

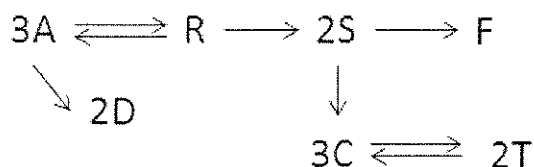
$$t_{\max} = \frac{\ln\left(\frac{k_2}{k_1}\right)}{k_2 - k_1}$$

### Дифференциальная селективность

$$S'_R = \frac{\text{скорость превращения исх. в } R}{\text{общая скорость превращения исх. в } R \text{ и } S}$$

$$S'_R = \frac{w_{A \rightarrow R}}{w_A} \text{ или при единичн. стехиом. } S'_R = \frac{w_R}{w_R + w_S}$$

1. Процесс описывается сложной параллельно-последовательной схемой превращения вида:



Все реакции протекают по механизму первого порядка. Записать скорости реакции по всем компонентам.

2. Константа скорости реакции  $A + B \rightarrow R$  составляет  $k = 100$  л/(моль·час). Начальные концентрации веществ А и В равны и составляют  $C_{A0} = C_{B0} = 0,08$  моль/л. Известно, что по окончании процесса концентрации исходных веществ А и В составили  $C_A = C_B = 0,04$  моль/л. Определить время протекания процесса (t).

$$t = 450 \text{ с.}$$

3. Энергия активации химической реакции без использования катализатора составляет  $E_A = 75,24$  кДж/моль, а если использовать катализатор, то энергия активации падает до значения  $E_{A_{\text{кт}}} = 50,14$  кДж/моль. Температура проведения обоих процессов составляет  $T = 298$  К. Определить, во сколько раз скорость процесса с катализатором выше/ниже, чем без катализатора.

$$r_{\text{кт}} / r = 25106.$$

4. В аппарате протекает параллельная реакция  $A \rightarrow R$  (1);  $A \rightarrow S$  (2). Константа скорости первой реакции равна  $k_1 = 0,28$  мин<sup>-1</sup>, константа скорости второй реакции равна  $k_2 = 0,12$  мин<sup>-1</sup>. По завершении процесса концентрация вещества А составила  $C_A = 2,6$  моль/л, а вещества R  $C_R = 2,8$  моль/л. Определить степень превращения вещества А ( $x_A$ ), конечную концентрацию вещества S ( $C_S$ ) и время проведения процесса (t).

$$x_A = 0,6; C_S = 1,2 \text{ моль/л; } t = 2,33 \text{ мин.}$$

5. В аппарате протекает последовательная реакция  $A \rightarrow R$  (1);  $R \rightarrow S$ . Константа скорости первой реакции равна  $k_1 = 0,2$  с<sup>-1</sup>, второй  $k_2 = 0,1$  с<sup>-1</sup>. Начальная концентрация вещества А составляет  $C_{A0} = 1,8$  моль/л, степень превращения вещества А  $x_A = 0,9$ . Определить конечную концентрацию продукта R ( $C_R$ ), интегральную ( $S_R$ ) и дифференциальную ( $S_R'$ ) селективности по продукту R.

$$C_R = 0,78 \text{ моль/л; } S_R = 0,48; S_R' = -1,17.$$

6. Известно, что скорость некой реакции при  $T_1 = 300 \text{ K}$  больше скорости этой же реакции при  $T_2 = 298 \text{ K}$  в 10 раз. Определить, чему равна энергия активации данной химической реакции.

**$E_A = 855,7 \text{ кДж/моль}$ .**

7. Протекает химическая реакция вида  $2A + 3B \rightarrow S + 4R + 2F$ . Известно, что скорость данной реакции по компоненту A составляет  $w_A = -5 \text{ моль/(л·с)}$ . Определить скорость данной реакции по остальным компонентам.

**$w_B = -7,5 \text{ моль/(л·с)}$ ;  $w_S = 2,5 \text{ моль/(л·с)}$ ;  $w_R = 10 \text{ моль/(л·с)}$ ;  $w_F = 5 \text{ моль/(л·с)}$ .**

8. В аппарате протекает параллельная реакция  $A \rightarrow R$  (1);  $A \rightarrow S$  (2). Константа скорости первой реакции равна  $k_1 = 1,8 \text{ мин}^{-1}$ , константа скорости второй реакции равна  $k_2 = 1,2 \text{ мин}^{-1}$ . Начальная концентрация вещества A составляет  $C_{A0} = 2,4 \text{ моль/л}$ . Конечная концентрация продукта S равна  $C_S = 0,8 \text{ моль/л}$ . Определить степень превращения вещества A ( $x_A$ ) и время проведения процесса (t).

**$x_A = 0,83$ ;  $t = 0,60 \text{ мин}$ .**

9. В аппарате протекает последовательная реакция  $A \rightarrow R$  (1);  $R \rightarrow S$ . Константа скорости первой реакции равна  $0,6 \text{ мин}^{-1}$ , второй  $-0,8 \text{ мин}^{-1}$ . Начальная концентрация вещества A составляет  $C_{A0} = 5 \text{ моль/л}$ , время проведения процесса  $t = 3 \text{ мин}$ . Определить конечную концентрацию продуктов R ( $C_R$ ) и S ( $C_S$ ) и степень превращения вещества A ( $x_A$ ).

**$C_R = 1,12 \text{ моль/л}$ ;  $C_S = 3,05 \text{ моль/л}$ ;  $x_A = 0,83$ .**

10. В аппарате протекает параллельная реакция  $A \rightarrow R$ ;  $A \rightarrow S$ . Константа скорости первой реакции равна  $k_1 = 10^{-3} \text{ с}^{-1}$ ,  $k_2 = 10^{-2} \text{ с}^{-1}$ . Начальная концентрация вещества A составляет  $C_{A0} = 2 \text{ моль/л}$ . Конечная концентрация продукта S равна  $C_S = 0,5 \text{ моль/л}$ , продукта R  $C_R = 0,05 \text{ моль/л}$ . Определить степень превращения вещества A ( $x_A$ ), время проведения процесса (t) и скорость реакции по всем веществам ( $w_A$ ,  $w_R$ ,  $w_S$ ).

**$x_A = 0,28$ ;  $t = 29,23 \text{ с}$ ;  $w_A = -0,016 \text{ моль/(л·с)}$ ;  $w_R = 0,0015 \text{ моль/(л·с)}$ ;  $w_S = 0,015 \text{ моль/(л·с)}$ .**



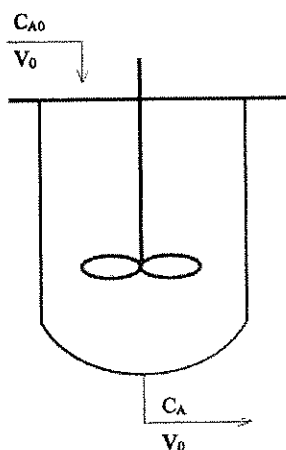
## ТЕОРИЯ РЕАКТОРОВ. ИЗОТЕРМИЧЕСКИЕ РИС-Н И РИВ

Реакторы можно разделить по следующим признакам:

- по мат. модели: РИС, РИВ
- по организации движения реакц. среды: проточные (непрерывные), непроточные (периодические)
- по температурному режиму: изотермические, адиабатические, политермические

### *Реактор идеального смешения непрерывного действия (РИС-н)*

$$W_i = \frac{C_i - C_{i0}}{\tau}, \text{ где } \tau = \frac{V_p}{\vartheta_0} - \text{усл. время пребывания реакц. смеси в реакторе}$$



#### Основные допущения при рассмотрении

##### РИС-н:

1. Изменение концентрации реагентов и продуктов реакции происходит скачкообразно в начальный момент времени
2. В любой точке реакционного объёма концентрация, температура, давление, скорость реакции одинаковы (это следствие идеального режима перемешивания внутри РИС)

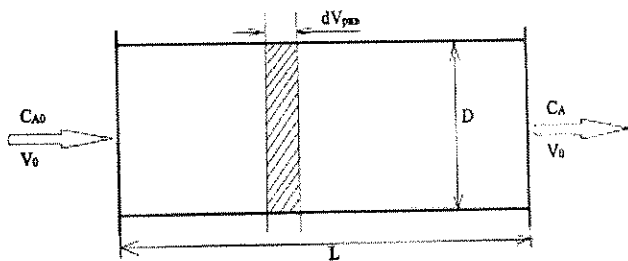
### *Реактор идеального вытеснения (РИВ)*

$$W_i = \frac{dC_i}{d\tau}$$

#### Основные допущения при рассмотрении

##### РИВ:

1. Изменение концентрации реагентов и продуктов реакции происходит постепенно по мере прохождения реакционной среды РИВ (по длине реактора)
2. В любой точке элементарного реакционного объёма  $dV_{\text{РИВ}}$  концентрация, температура, давление, скорость реакции одинаковы. Нет перемешивания реакционной среды между разными элементарными объёмами
3. Движение потока «поршневое» (нет пристеночного эффекта)



### *Производительность/нагрузка реактора*

$$P_i = C_i \cdot \vartheta_0$$

- если расчёт ведётся по продукту, то «производительность» (берётся конечная концентрация)
- если расчёт ведётся по исх. соединению, то «нагрузка» (берётся начальная концентрация)

### ***Простые химические реакции***

1. Константа скорости реакции  $A \rightarrow R$  составляет  $k = 0,45 \text{ мин}^{-1}$ . Определить степень превращения вещества  $A$  ( $x_A$ ) при проведении процесса в РИС и РИВ, если их объёмы равны и составляют  $V_{\text{РИС}} = V_{\text{РИВ}} = 150 \text{ л}$ , а объёмный расход исходной смеси равен  $v_0 = 30 \text{ л/мин}$ .

**$x_{A \text{ РИС}} = 0,69$ ;  $x_{A \text{ РИВ}} = 0,89$ .**

2. В РИС объёмом  $V_{\text{РИС}} = 2,6 \text{ м}^3$  проводится обратимая реакция  $2A \leftrightarrow R$ . Константа скорости прямой реакции составляет  $k_1 = 31,4 \text{ л/(моль} \cdot \text{мин)}$ , обратной  $k_{-1} = 2 \text{ мин}^{-1}$ . Начальная концентрация вещества  $A$  равна  $C_{A0} = 0,6 \text{ моль/л}$ , вещество  $R$  в исходной смеси отсутствовало. Определить производительность РИС по продукту  $R$  ( $\Pi_R$ ) в кмоль/час, если степень превращения вещества  $A$  равна  $x_A = 0,7$ .

**$\Pi_R = 93,62 \text{ кмоль/час}$ .**

3. В РИС объёмом  $V_{\text{РИС}} = 1,8 \text{ м}^3$  проводится реакция  $A + B \rightarrow R$  с константой скорости  $k = 0,005 \text{ л/(моль} \cdot \text{мин)}$ . Реагенты  $A$  и  $B$  подаются отдельно, концентрации исходных веществ  $A$  и  $B$  в исходных потоках равны соответственно  $C_{A\text{исх}} = 2,4 \text{ моль/л}$  и  $C_{B\text{исх}} = 3,6 \text{ моль/л}$ . Соотношение потоков с реагентами  $A$  и  $B$  1:1. Степень превращения вещества  $A$  составляет  $x_A = 0,8$ . Определить нагрузку реактора по исходным соединениям ( $\Pi_{A0}$ ,  $\Pi_{B0}$ ).

**$\Pi_{A0} = 2,27 \text{ моль/мин}$ ;  $\Pi_{B0} = 3,40 \text{ моль/мин}$ .**

4. В РИС объёмом  $V_{\text{РИС}} = 200 \text{ л}$  проводится реакция  $2A \rightarrow R$  с константой скорости  $k = 2,3 \cdot 10^{-3} \text{ л/(моль} \cdot \text{с)}$ . Начальная концентрация вещества  $A$  составляет  $C_{A0} = 0,6 \text{ моль/л}$ , объёмный расход исходной реакционной смеси равен  $v_0 = 3,6 \text{ м}^3/\text{час}$ . Определить производительность РИС по продукту  $R$  ( $\Pi_R$ ) в кмоль/час и объём РИВ ( $V_{\text{РИВ}}$ ), нужный для такой же производительности.

**$\Pi_R = 0,31 \text{ кмоль/час}$ ;  $V_{\text{РИВ}} = 143,70 \text{ л}$ .**

5. В РИВ проводится реакция  $A \rightarrow 2R$ . Константа скорости данной реакции составляет  $k = 0,3 \text{ л/((моль}\cdot\text{с))}$ . Начальная концентрация вещества  $A$  равна  $C_{A0} = 2,8 \text{ моль/л}$ , концентрация продукта  $R$  на выходе из РИВ равна  $C_R = 5,32 \text{ моль/л}$ , производительность реактора по продукту  $R$  составляет  $\Pi_R = 4,256 \text{ кмоль/час}$ . Определить степень превращения вещества  $A$  ( $x_A$ ) и объём РИВ ( $V_{\text{РИВ}}$ ).

**$x_A = 0,95$ ;  $V_{\text{РИВ}} = 5 \text{ л}$ .**

6. В РИС объёмом  $V_{\text{РИС}} = 0,12 \text{ м}^3$  проводится обратимая реакция  $A + B \leftrightarrow R + S$  с константами скорости прямой и обратной реакций  $k_1 = 0,118 \text{ л/((моль}\cdot\text{с))}$  и  $k_{-1} = 0,005 \text{ л/((моль}\cdot\text{с))}$ . Вещества  $A$  и  $B$  подаются совместно, их концентрации в исходной смеси соответственно равны  $C_{A0} = 2,8 \text{ моль/л}$  и  $C_{B0} = 1,6 \text{ моль/л}$ . Вещества  $R$  в исходной реакционной смеси не было. Определить производительность РИС по продукту  $R$  ( $\Pi_R$ ) в кмоль/час, если степень превращения вещества  $B$  составила  $x_B = 0,75$ .  **$\Pi_R = 29,51 \text{ кмоль/час}$ .**

7. В РИС объёмом  $V_{\text{РИС}} = 0,2 \text{ м}^3$  проводится химическая реакция  $3A \rightarrow 2R$  с константой скорости  $k = 0,55 \text{ мин}^{-1}$ . Объёмный расход реакционной смеси  $v_0 = 80 \text{ л/мин}$ , начальная концентрация вещества  $A$  равна  $C_{A0} = 3,6 \text{ моль/л}$ . Определить производительность РИС по продукту  $R$  ( $\Pi_R$ ) в кмоль/час.  **$\Pi_R = 9,22 \text{ кмоль/час}$ .**

8. Определить нагрузку по исходному веществу ( $\Pi_R$ ) на РИС и РИВ при проведении реакции  $A \rightarrow R$  с константой скорости  $k = 0,12 \text{ мин}^{-1}$ , если объёмы реакторов равны и составляют  $V_{\text{РИС}} = V_{\text{РИВ}} = 0,8 \text{ м}^3$ , исходная концентрация вещества  $A$  равна  $C_{A0} = 3 \text{ моль/л}$ , а требуемая степень превращения вещества  $A$   $x_A = 0,85$ .  **$\Pi_{A0 \text{ РИС}} = 50,85 \text{ моль/мин}$ ;  $\Pi_{A0 \text{ РИВ}} = 151,80 \text{ моль/мин}$ .**

$A \rightarrow R \rightarrow S$	$A \rightarrow R; A \rightarrow S$
РИС-н	
$\begin{cases} w_A = -k_1 C_A \\ w_A = \frac{C_A - C_{A0}}{\tau} \end{cases}$ $C_A = \frac{C_{A0}}{1 + k_1 \tau_{\text{РИС}}}$ $\begin{cases} w_R = k_1 C_A - k_2 C_R \\ w_R = \frac{C_R - C_{R0}}{\tau} = \frac{C_R}{\tau} \end{cases}$ $C_R = \frac{k_1 \tau_{\text{РИС}} C_A}{1 + k_2 \tau_{\text{РИС}}}$ $\tau_{\text{РИС} \max} = \frac{1}{\sqrt{k_1 k_2}}$ $\begin{cases} w_S = k_2 C_R \\ w_S = \frac{C_S - C_{S0}}{\tau} = \frac{C_S}{\tau} \end{cases}$ $C_S = k_2 \tau_{\text{РИС}} C_R$	$\begin{cases} w_A = -k_1 C_A - k_2 C_A \\ w_A = \frac{C_A - C_{A0}}{\tau} \end{cases}$ $C_A = \frac{C_{A0}}{1 + (k_1 + k_2) \tau_{\text{РИС}}}$ $\begin{cases} w_R = k_1 C_A \\ w_R = \frac{C_R - C_{R0}}{\tau} = \frac{C_R}{\tau} \end{cases}$ $C_R = k_1 \tau_{\text{РИС}} C_A$ $\begin{cases} w_S = k_2 C_A \\ w_S = \frac{C_S - C_{S0}}{\tau} = \frac{C_S}{\tau} \end{cases}$ $C_S = k_2 \tau_{\text{РИС}} C_A$
РИВ	
$\begin{cases} w_A = -k_1 C_A \\ w_A = \frac{dC_A}{d\tau} \end{cases}$ $C_A = C_{A0} \cdot \exp(-k_1 \cdot \tau_{\text{РИВ}})$ $\begin{cases} w_R = k_1 C_A - k_2 C_R \\ w_R = \frac{dC_R}{d\tau} \end{cases}$ $C_R = C_{A0} \cdot \frac{k_1}{k_2 - k_1} \cdot (e^{(-k_1 \cdot \tau_{\text{РИВ}})} - e^{(-k_2 \cdot \tau_{\text{РИВ}})})$ $\tau_{\text{РИВ} \max} = \frac{\ln(\frac{k_2}{k_1})}{k_2 - k_1}$ $\begin{cases} w_S = k_2 C_R \\ w_S = \frac{dC_S}{d\tau} \end{cases}$ $C_S = (C_{A0} - C_A - C_R)$	$\begin{cases} w_A = -k_1 C_A - k_2 C_A \\ w_A = \frac{dC_A}{d\tau} \end{cases}$ $C_A = C_{A0} \cdot \exp(-(k_1 + k_2) \cdot \tau_{\text{РИВ}})$ $\begin{cases} w_R = k_1 C_A \\ w_R = \frac{dC_R}{d\tau} \end{cases}$ $C_R = C_{A0} \cdot \frac{k_1}{k_1 + k_2} \cdot (1 - \exp(-(k_1 + k_2) \cdot \tau_{\text{РИВ}}))$ $\begin{cases} w_S = k_2 C_A \\ w_S = \frac{dC_S}{d\tau} \end{cases}$ $C_S = C_{A0} \cdot \frac{k_2}{k_1 + k_2} \cdot (1 - \exp(-(k_1 + k_2) \cdot \tau_{\text{РИВ}}))$

## Сложные химические реакции

1. Константы скорости целевой и побочной реакций в параллельном процессе  $A \rightarrow R$  (1),  $A \rightarrow S$  (2) составляют соответственно  $k_1 = 0,28$  л/(моль·мин),  $k_2 = 0,12$  л/(моль·мин). Начальная концентрация исходного реагента А составляет  $C_{A0} = 1,6$  моль/л, объёмный расход исходной смеси равен  $v_0 = 100$  л/мин. Определить степень превращения вещества А ( $x_A$ ) и объём РИС ( $V_{\text{РИС}}$ ), если производительность реактора по продукту R составляет  $\Pi_R = 4,8$  кмоль/час.

$$x_A = 0,71; V_{\text{РИС}} = 1,36 \text{ м}^3.$$

2. Константы скорости целевой и побочной реакций в последовательном процессе  $A \rightarrow R$  (1),  $R \rightarrow S$  (2) составляют соответственно  $k_1 = 2 \text{ с}^{-1}$ ,  $k_2 = 0,8 \text{ с}^{-1}$ . Начальная концентрация исходного реагента А составляет  $C_{A0} = 1,8$  моль/л, объёмный расход исходной смеси равен  $v_0 = 1,2 \text{ м}^3/\text{час}$ . Определить объём РИС ( $V_{\text{РИС}}$ ), требуемый для достижения максимальной концентрации целевого продукта R, а также производительность реактора по целевому продукту R ( $\Pi_R$ ).

$$V_{\text{РИС}} = 0,26 \text{ л}; \Pi_R = 0,81 \text{ кмоль/час}.$$

3. Константы скорости целевой и побочной реакций в параллельном процессе  $A \rightarrow R$  (1),  $A \rightarrow S$  (2) составляют соответственно  $k_1 = 1,25 \text{ мин}^{-1}$ ,  $k_2 = 0,15 \text{ мин}^{-1}$ . Начальная концентрация исходного реагента А составляет  $C_{A0} = 6$  моль/л, объёмный расход исходной смеси равен  $v_0 = 20$  л/мин. Требуемая производительность реактора составляет  $\Pi_R = 54$  моль/мин. Определить степень превращения вещества А ( $x_A$ ), объём РИВ ( $V_{\text{РИВ}}$ ) и объём РИС ( $V_{\text{РИС}}$ ), необходимые для указанной производительности.

$$x_A = 0,50; V_{\text{РИВ}} = 10 \text{ л}; V_{\text{РИС}} = 14,52 \text{ л}.$$

4. Константы скорости целевой и побочной реакций в последовательном процессе  $A \rightarrow R$  (1),  $R \rightarrow S$  (2) составляют соответственно  $k_1 = 0,18 \text{ мин}^{-1}$ ,  $k_2 = 0,06 \text{ мин}^{-1}$ . Начальная концентрация исходного реагента А составляет  $C_{A0} = 2,4$  моль/л, объёмный расход исходной смеси равен  $v_0 = 40$  л/мин. Определить концентрации веществ А, R, S ( $C_A$ ,  $C_R$ ,  $C_S$ ) на выходе из РИС объёмом  $V_{\text{РИС}} = 60$  л при проведении в нём вышеописанной последовательной реакции.

$$C_A = 1,89 \text{ моль/л}; C_R = 0,47 \text{ моль/л}; C_S = 0,04 \text{ моль/л}.$$

5. Константы скорости целевой и побочной реакций в последовательном процессе  $A \rightarrow R$  (1),  $R \rightarrow S$  (2) составляют соответственно  $k_1 = 0,6 \text{ час}^{-1}$ ,  $k_2 = 0,8 \text{ час}^{-1}$ . Начальная концентрация исходного реагента А составляет  $C_{A0} = 5$  моль/л, объёмный расход исходной смеси равен  $v_0 = 2,4 \text{ м}^3/\text{час}$ . Определить объёмы РИС ( $V_{\text{РИС}}$ ) и РИВ ( $V_{\text{РИВ}}$ ), а также производительность реакторов по целевому продукту R ( $\Pi_R$ ), если требуемая степень превращения вещества А составляет  $x_A = 0,8$ .

$$V_{\text{РИС}} = 16,01 \text{ м}^3; V_{\text{РИВ}} = 6,43 \text{ м}^3; \Pi_{\text{РИС}} = 1,51 \text{ кмоль/час}; \Pi_{\text{РИВ}} = 3 \text{ кмоль/час}.$$

6. Константы скорости целевой и побочной реакций в параллельном процессе  $A \rightarrow R$  (1),  $A \rightarrow S$  (2) составляют соответственно  $k_1 = 4$  л/(моль·мин),  $k_2 = 1,9$  л/(моль·мин). Начальная концентрация исходного реагента А составляет  $C_{A0} = 0,8$  моль/л, объёмный расход исходной смеси равен  $v_0 = 2,4$  л/мин. Определить объём РИС ( $V_{\text{РИС}}$ ) и его производительность по целевому продукту R ( $\Pi_R$ ), если степень превращения вещества А  $x_A = 0,8$ .

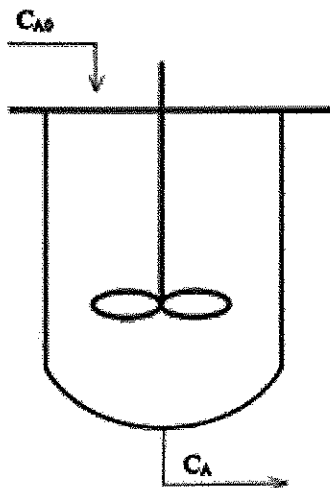
$$V_{\text{РИС}} = 10,18 \text{ л}; \Pi_R = 62,4 \text{ моль/час}.$$

## ТЕОРИЯ РЕАКТОРОВ. ИЗОТЕРМИЧЕСКИЙ РИС-П

Все реагенты вводятся до начала процесса вручную, продукт выгружается только после полной остановки реактора по окончании процесса.

$$W_i = \frac{dC_i}{dt_{\text{х.р.}}}, \text{ где } t_{\text{х.р.}} - \text{ время проведения реакции в РИС - п}$$

$$t_{\Sigma} = t_{\text{х.р.}} + t_{\text{всп.}}, \text{ где } t_{\text{всп.}} - \text{ время, затрачиваемое на всп. операции (загрузка/выгрузка, промывка)}$$



### Основные допущения при рассмотрении РИС-п:

1. Изменение концентрации реагентов и продуктов реакции происходит постепенно по мере протекания химической реакции
2. В любой точке реакционного объема в каждый момент времени концентрация, температура, давление, скорость реакции одинаковы (это следствие идеального режима перемешивания внутри РИС)

### Преимущества и недостатки организации процесса в РИС-п:

#### Минусы:

- Затрата времени на вспомогательные операции – снижение производительности РИС-п
- Большая доля ручного труда
- Сложность решения задач автоматизации процесса

#### Плюсы:

- РИС-п приспособлен к широкому диапазону условий проведения реакций

РИС-п используется для технологических процессов с небольшими мощностями, но высокой ценой продукта.

1. В РИС-п проводится реакция  $A \rightarrow R$  с константой скорости  $k = 0,026 \text{ мин}^{-1}$ . Реактор должен производить  $N_R = 4,8$  кмоль продукта  $R$  за  $t = 8$  часов. Чтобы загрузить реактор, нагреть его до нужной температуры и разгрузить после окончания процесса, требуется  $t_{\text{всп}} = 1$  час. Определить объем РИС-п ( $V_{\text{РИС-п}}$ ) для проведения данного процесса, если начальная концентрация  $A$  составляет  $C_{A0} = 8$  моль/л, а превращению подвергается 99 % исходного вещества. Определить также объемы РИС-н ( $V_{\text{РИС-н}}$ ) и РИВ ( $V_{\text{РИВ}}$ ) для получения такого же количества продукта в сутки при той же степени превращения вещества  $A$ .

$$V_{\text{РИС-п}} = 0,30 \text{ м}^3; V_{\text{РИС-н}} = 4,82 \text{ м}^3; V_{\text{РИВ}} = 0,23 \text{ м}^3.$$

2. В РИС-п проводится реакция  $A \rightarrow R$ . Время проведения процесса в аппарате составляет  $t_{\text{хр}} = 120$  с, достигаемая степень превращения равна  $x_{A \text{ РИС-п}} = 0,2$ . Рассчитать степень превращения исходного вещества  $A$  ( $x_{A \text{ РИС-н}}$ ), если эту же реакцию провести в РИС-н с условным временем пребывания  $\tau = 360$  с.

$$x_{A \text{ РИС-н}} = 0,4.$$

3. В РИС-п проводится сложная параллельная реакция  $A \rightarrow R$  (1),  $A \rightarrow S$  (2), порядки обеих реакций – первые. Время проведения процесса в аппарате составляет  $t_{\text{хр}} = 50$  мин, достигаемая степень превращения равна  $x_A = 0,9$ . Определить константы скоростей целевой и побочной реакций, если на выходе из аппарата концентрация вещества  $S$  составила  $C_S = 1$  моль/л, а вещества  $R$   $C_R = 9,1$  моль/л.

$$k_1 = 0,042 \text{ мин}^{-1}; k_2 = 0,0046 \text{ мин}^{-1}.$$

## АДИАБАТИЧЕСКИЙ РИС-н

$$w_A = \frac{C_A - C_{A0}}{\tau} = - \frac{C_{A0} \cdot x_A}{\tau}$$

$$\frac{T - T_0}{\tau} = \frac{Q_{x.p.}}{C_{p,об.}} \cdot r(C, T) - \frac{K_T \cdot F_{уд.}}{C_{p,об.}} \cdot (T - T_{хл.})$$

Второе слагаемое описывает процесс теплообмена с теплоносителем, поэтому, при рассмотрении адиабатических процессов, это слагаемое приравнивается к нулю.

$$\frac{T - T_0}{\tau} = \frac{Q_{x.p.}}{C_{p,об.}} \cdot \frac{C_{A0} \cdot x_A}{\tau}$$

$$T - T_0 = \frac{Q_{x.p.} \cdot C_{A0}}{C_{p,об.}} \cdot x_A = \frac{Q_{x.p.} \cdot C_{A0}}{C_{p,уд.} \cdot \rho} \cdot x_A = \Delta T_{ад} \cdot x_A,$$

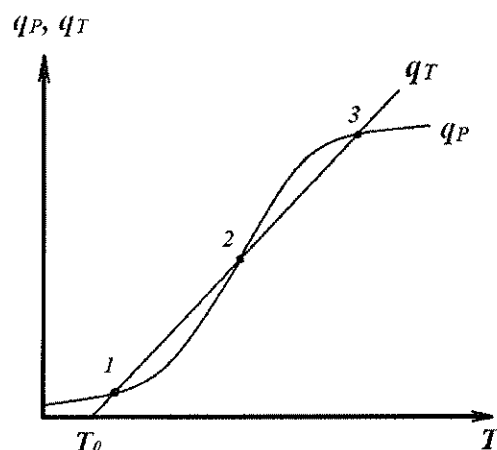
где  $\Delta T_{ад}$  – адиабатический разогрев – на сколько реакционная смеси нагреется/охладится при проведении адиабатического процесса при условии полного превращения исходного вещества.

Точки 1 и 3 на графике зависимости тепловыделения ( $q_p$ ) и теплоотвода ( $q_T$ ) от температуры  $T$  соответствуют устойчивому тепловому режиму

Точка 2 на графике соответствует неустойчивому тепловому режиму

$$q_p = Q_{x.p.} \cdot C_{A0} \cdot x_A \cdot V_0, \text{ кДж/час или Дж/с}$$

$$q_T = C_p \cdot \rho \cdot V_0 \cdot (T - T_0), \text{ кДж/час или Дж/с}$$



1. В адиабатическом РИС-н объемом  $V_{\text{РИС}} = 0,3 \text{ м}^3$  проводится экзотермическая реакция  $A \rightarrow R$ . Тепловой эффект реакции равен  $Q_{\text{хр}} = 9637 \text{ кДж/кмоль}$ . Удельная теплоёмкость реакционной смеси не зависит от температуры и составляет  $C_{p\text{ м}} = 3,98 \text{ кДж/(кг} \cdot \text{К)}$ , плотность реакционной смеси не зависит от состава и составляет  $\rho = 420 \text{ кг/м}^3$ . Объёмный расход исходной смеси равен  $v_0 = 0,6 \text{ м}^3/\text{час}$ , концентрация вещества А в этой смеси  $C_{A0} = 6 \text{ моль/л}$ . Определить, какой должна быть температура на входе в адиабатический РИС-н ( $t_0$ ), если известно, что температура потока на выходе составляет  $t = 60 \text{ }^\circ\text{C}$ , а константа скорости реакции зависит от температуры по уравнению:

$$k = 10^3 \exp\left(\frac{-20000}{RT}\right), [\text{мин}^{-1}].$$

**$t_0 = 26,9 \text{ }^\circ\text{C}$ .**

2. В адиабатическом РИС-н проводится эндотермическая реакция  $A \rightarrow R$ . Тепловой эффект реакции равен  $Q_{\text{хр}} = -23000 \text{ Дж/моль}$ . Удельная теплоёмкость реакционной смеси не зависит от температуры и составляет  $C_{p\text{ м}} = 1,3 \text{ кДж/(кг} \cdot \text{К)}$ , плотность реакционной смеси не зависит от состава и составляет  $\rho = 1030 \text{ кг/м}^3$ . Концентрация вещества А в исходном потоке составляет  $C_{A0} = 1,7 \text{ моль/л}$ , объёмная скорость исходного потока равна  $v_0 = 1,2 \text{ л/с}$ . Определить степень превращения вещества А ( $x_A$ ) и объём РИС-н ( $V_{\text{РИС}}$ ) для проведения процесса, если известно, что температура потока на входе составляет  $t_0 = 72 \text{ }^\circ\text{C}$ , на выходе  $t = 60 \text{ }^\circ\text{C}$ , а константа скорости реакции зависит от температуры по уравнению:

$$k = 2,4 \cdot 10^3 \exp\left(\frac{-27000}{RT}\right), [\text{с}^{-1}].$$

**$x_A = 0,41$ ;  $V_{\text{РИС}} = 5,95 \text{ л}$ .**

3. В адиабатическом РИС-н объемом  $V_{\text{РИС}} = 10 \text{ м}^3$  проводится экзотермическая реакция  $A \rightarrow R$ . Тепловой эффект реакции равен  $Q_{\text{хр}} = 2,1 \cdot 10^7 \text{ Дж/кмоль}$ . Удельная теплоёмкость реакционной смеси не зависит от температуры и составляет  $C_{p\text{ м}} = 2082 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}$ , плотность реакционной смеси не зависит от состава и составляет  $\rho = 1420 \text{ кг/м}^3$ . Объёмный расход исходной смеси равен  $v_0 = 3,6 \text{ м}^3/\text{час}$ , концентрация вещества А в этой смеси  $C_{A0} = 6 \text{ моль/л}$ . Определить, какой должна быть температура на входе в адиабатический РИС-н ( $t_0$ ), если известно, что температура потока на выходе составляет  $T = 353 \text{ К}$ , а константа скорости реакции зависит от температуры по уравнению:

$$k = 10^{14} \exp\left(\frac{-12000}{T}\right), [\text{мин}^{-1}].$$

**$t_0 = 37,88 \text{ }^\circ\text{C}$ .**

4. В адиабатическом РИС-н проводится экзотермическая реакция  $2A \rightarrow R + S$ . Тепловой эффект реакции равен  $Q_{\text{хр}} = 75000 \text{ Дж/кмоль}$ . Объёмная теплоёмкость реакционной смеси не зависит от температуры и составляет  $C_{p\text{ в}} = 1,8 \text{ кДж/(м}^3 \cdot \text{К)}$ . Объёмный расход исходной смеси равен  $v_0 = 12 \text{ м}^3/\text{час}$ , концентрация вещества А в этой смеси  $C_{A0} = 1,2 \text{ моль/л}$ . Определить объём РИС-н ( $V_{\text{РИС}}$ ) для проведения данного процесса, если известно, что температура потока на входе составляет  $t_0 = 20 \text{ }^\circ\text{C}$ , степень превращения вещества А равна  $x_A = 0,8$  а константа скорости реакции зависит от температуры по уравнению:

$$k = 5,08 \cdot 10^5 \exp\left(\frac{-42300}{RT}\right), \left[\frac{\text{л}}{\text{моль} \cdot \text{с}}\right].$$

**$V_{\text{РИС-н}} = 0,24 \text{ м}^3$ .**

5. В адиабатическом РИС-н объемом  $V_{\text{РИС}} = 1,26 \text{ м}^3$  проводится экзотермическая реакция  $2A \rightarrow R$ . Тепловой эффект реакции равен  $Q_{\text{хр}} = 2,7 \cdot 10^7 \text{ Дж/кмоль}$ . Удельная теплоёмкость реакционной смеси не зависит от температуры и составляет  $C_{p\text{ м}} = 2,2 \cdot 10^3 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}$ , плотность реакционной смеси не зависит от состава и составляет  $\rho = 850 \text{ кг/м}^3$ . Концентрация вещества А в исходном потоке составляет  $C_{A0} = 3,2 \text{ кмоль/м}^3$ . Определить производительность РИС-н, если известно, что температура потока на входе составляет  $T_0 = 325 \text{ К}$ , на выходе  $T = 357 \text{ К}$ , а константа скорости реакции зависит от температуры по уравнению:

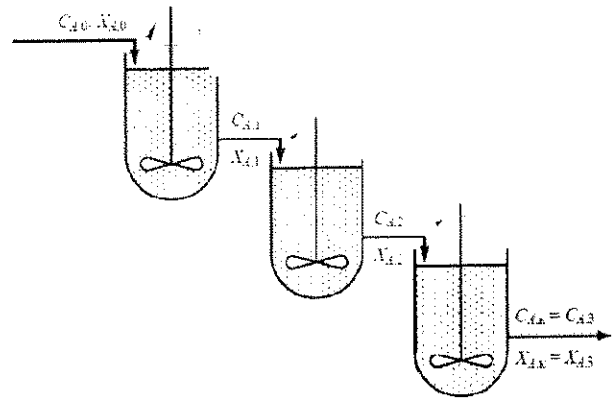
$$k = 7,9 \cdot 10^{-2} \exp\left(\frac{-1200}{T}\right), [\text{с}^{-1}].$$

**$\Pi_R = 12,02 \text{ кмоль/час}$ .**



## КАСКАД РИС-Н. АНАЛИТИЧЕСКИЙ И ГРАФИЧЕСКИЙ МЕТОДЫ РАСЧЁТА К-РИС-Н

1. Состав реакционной смеси меняется от реактора к реактору
2. Параметры процесса постоянны в каждом отдельном РИС-н
3. Выходной поток предыдущего РИС-н является входным для следующего РИС-н в каскаде



Для реакций *первого порядка*:

Получим формулу для нахождения конечной концентрации вещества А на выходе из каскада трёх РИС-н при равных объёмах всех реакторов. Для этого составим математическое описание химического процесса в первом реакторе каскада:

$$\begin{cases} w_A = -kC_{A1} \\ w_A = \frac{C_{A1} - C_{A0}}{\tau_{ед}} \end{cases}$$

$$\frac{C_{A1} - C_{A0}}{\tau_{ед}} = -kC_{A1}$$

$$C_{A1} = C_{A2н} = \frac{C_{A0}}{1 + k\tau_{ед}}$$

.....

$$C_{Ak} = C_{A3} = \frac{C_{A0}}{(1 + k\tau_{ед})^3}$$

или в общем виде формула имеет вид:

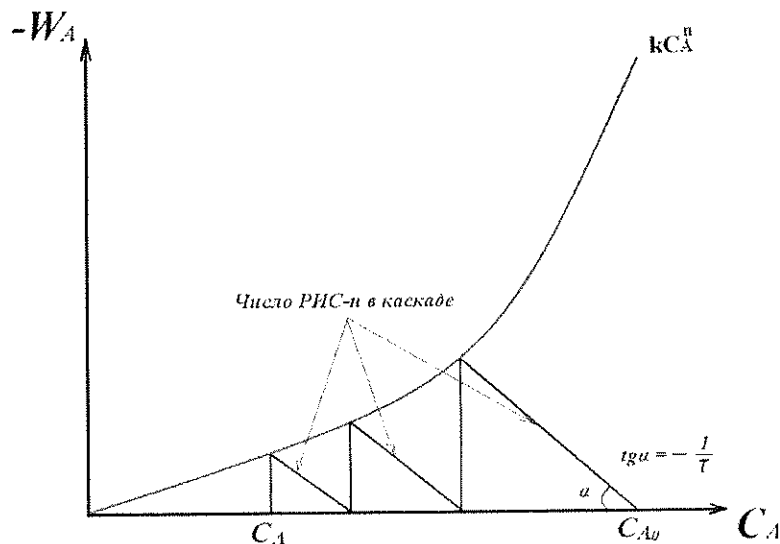
$$C_{Ak} = \frac{C_{A0}}{(1 + k\tau_{ед})^m},$$

где  $m$  – число реакторов в к-РИС-н

Для реакций *дробного порядка* или *второго и более* – графический метод расчёта к-РИС-н:

$$\begin{cases} w_A = -kC_A^n \\ w_A = \frac{C_A - C_{A0}}{\tau} \end{cases}$$

$$\begin{cases} -w_A = kC_A^n \\ -w_A = \frac{C_{A0} - C_A}{\tau} = \frac{C_{A0}}{\tau} - \frac{1}{\tau} \cdot C_A \end{cases}$$



1. Определить объёмы РИС-н, РИВ и объём каскада РИС-н ( $V_{\text{РИС-н}}$ ,  $V_{\text{РИВ}}$ ,  $V_{\text{к-РИС-н}}$ ), требующиеся для проведения простой необратимой реакции  $2A \rightarrow R$  до степени превращения вещества А  $x_A = 0,8$ , если известно, что константа скорости реакции составляет  $k = 0,6 \text{ м}^3/(\text{кмоль} \cdot \text{час})$ , объёмный расход исходной реакционной смеси составляет  $v_0 = 2,8 \text{ м}^3/\text{час}$ , концентрация исходного вещества А в этом потоке  $C_{A0} = 24 \text{ моль/л}$ , объём единичного реактора в каскаде  $V_{\text{ед}}$  составляет 10 % от объёма РИС-н  $V_{\text{РИС-н}}$ . Использовать графический метод расчёта каскада.

**$V_{\text{РИС-н}} = 1,93 \text{ м}^3$ ;  $V_{\text{РИВ}} = 0,39 \text{ м}^3$ ;  $V_{\text{к-РИС-н}} = 0,77 \text{ м}^3$ .**

2. В РИС-н объёмом  $V_{\text{РИС-н}} = 0,1 \text{ м}^3$  проводится простая обратимая реакция  $A + B \leftrightarrow R + S$ , константы скорости прямой и обратной реакций равны  $k_1 = 0,12 \text{ м}^3/(\text{кмоль} \cdot \text{с})$  и  $k_{-1} = 0,05 \text{ м}^3/(\text{кмоль} \cdot \text{с})$  соответственно. Достижимая степень превращения  $x_A$  составляет 75 % от равновесной  $x_A^*$ . Начальные концентрации исходных веществ А и В равны и составляют  $C_{A0} = C_{B0} = 1,4 \text{ кмоль/м}^3$ . Определить, какое число реакторов в каскаде ( $m$ ) потребуется для проведения этой же реакции с такой же степенью превращения вещества А, если объём единичного реактора в каскаде равен  $V_{\text{ед}} = 0,02 \text{ м}^3$ . Использовать графический метод расчёта каскада.

**$m = 3$ .**

3. Протекает простая необратимая реакция  $A + B \rightarrow 2R$  с константой скорости реакции  $k = 2 \text{ л}/(\text{моль} \cdot \text{мин})$ . Начальные концентрации веществ А и В равны и составляют  $C_{A0} = C_{B0} = 1,4 \text{ моль/л}$ , объёмный расход исходной смеси равен  $v_0 = 10 \text{ л/мин}$ . Определить, сколько РИС-н в каскаде ( $m$ ) нужно и каков будет объём единичного реактора ( $V_{\text{ед}}$ ), если известно, что степень превращения вещества А в к-РИС-н равна  $x_A = 0,75$ , а степень превращения А в первом реакторе каскада  $x_{A1} = 0,25$ . Использовать графический метод расчёта каскада.

**$V_{\text{ед}} = 1,6 \text{ л}$ ;  $m = 8$ .**

4. В каскаде, состоящем из трёх РИС-н, протекает простая необратимая реакция  $A \rightarrow 2R$  с константой скорости химической реакции равной  $k = 8,3 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$ . Объёмный расход исходной реакционной смеси составляет  $v_0 = 0,13 \text{ м}^3/\text{мин}$ , концентрация исходного вещества А в этом потоке  $C_{A0} = 0,36 \text{ моль/л}$ . Объём одного РИС-н  $V_{\text{ед}} = 0,3 \text{ м}^3$ . Определить производительность каскада по продукту R ( $\Pi_R$ ) в кмоль/час, используя и аналитический, и графический метод расчёта.

**$\Pi_R = 5 \text{ кмоль/час}$ .**

5. В каскаде из трёх реакторов идеального смешения (к-РИС-н) проходит реакция  $A \rightarrow R$ , константа скорости данной реакции  $k = 0,02 \text{ с}^{-1}$ . Объёмы реакторов в каскаде:  $V_{\text{РИС-н1}} = 0,15 \text{ м}^3$ ,  $V_{\text{РИС-н2}} = 0,25 \text{ м}^3$ ,  $V_{\text{РИС-н3}} = 0,5 \text{ м}^3$ . Начальная концентрация вещества А  $C_{A0} = 20,4 \text{ кмоль/м}^3$ . Объёмный расход исходной смеси  $v_0 = 18 \text{ м}^3/\text{час}$ . Определить производительность данной системы по продукту R ( $\Pi_R$ ) в кмоль/час. Использовать графический метод расчёта каскада.

**$\Pi_R = 329 \text{ кмоль/час}$ .**

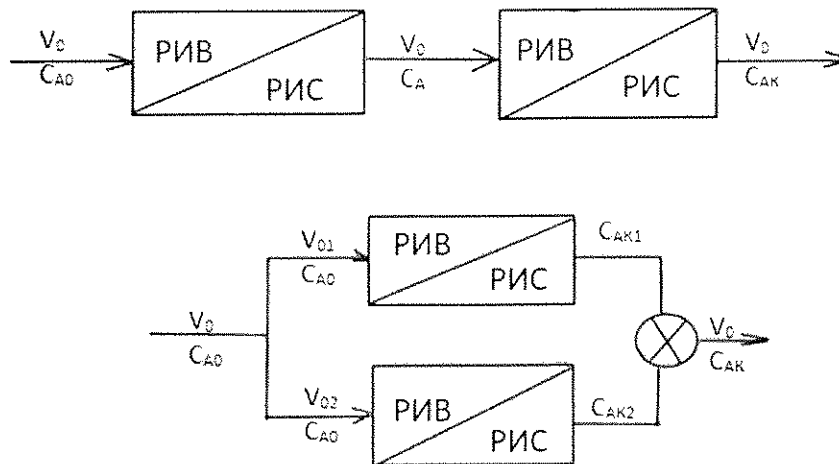
6. В каскаде из трёх реакторов идеального смешения (к-РИС-н) проходит реакция  $2A \rightarrow R$ , объём каждого реактора в каскаде  $V_{\text{ед}} = 5 \cdot 10^{-3} \text{ м}^3$ . Температуры процесса в реакторах каскада:  $t_1 = 20 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $t_2 = 35 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $t_3 = 55 \text{ }^\circ\text{C}$ . Константа скорости зависит от температуры по уравнению Аррениуса:

$$k = 4,5 \cdot 10^5 \exp\left(\frac{-32162,4}{RT}\right) \cdot \left[\frac{\text{м}^3}{\text{кмоль} \cdot \text{с}}\right].$$

Начальная концентрация А  $C_{A0} = 2 \text{ моль/л}$ . Объёмный расход исходной смеси  $v_0 = 3 \cdot 10^{-2} \text{ м}^3/\text{с}$ . Определить производительность данной системы по продукту R ( $\Pi_R$ ) в кмоль/час. Использовать графический метод расчёта каскада.

**$\Pi_R = 77,2 \text{ кмоль/час}$ .**

## ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОЕ И ПАРАЛЛЕЛЬНОЕ СОЕДИНЕНИЕ РЕАКТОРОВ



1. В установке, состоящей из РИВ и РИС-н одного объёма  $V_{\text{РИС}} = V_{\text{РИВ}} = 0,02 \text{ м}^3$ , соединённых параллельно, проводится простая необратимая реакция  $2A \rightarrow R + S$  с константой скорости  $k = 0,05 \text{ м}^3/(\text{кмоль} \cdot \text{с})$ . Объёмный расход исходной смеси, поступающий в установку, равен  $v_0 = 0,21 \text{ м}^3/\text{мин}$ , начальная концентрация вещества А составляет  $C_{A0} = 0,6 \text{ кмоль/м}^3$ . Определить производительность установки в кмоль/час ( $\Pi_R$ ) исходя из условий, что степень превращения вещества А в РИВ и РИС-н одинакова  $x_{A \text{ РИС}} = x_{A \text{ РИВ}}$ .

**$\Pi_R = 1,36 \text{ кмоль/час}$ .**

2. В установке, состоящей из РИС-н (1ый реактор) объёмом  $V_{\text{РИС}} = 15 \text{ л}$  и РИВ (2ой реактор) объёмом  $V_{\text{РИВ}} = 30 \text{ л}$ , соединённых последовательно, проводится простая необратимая реакция  $2A \rightarrow 3R$  с константой скорости  $k = 0,24 \text{ с}^{-1}$ . Нагрузка установки по веществу А составляет  $\Pi_{A0} = 270 \text{ моль/мин}$ , начальная концентрация вещества А в исходном потоке составляет  $C_{A0} = 1,8 \text{ кмоль/м}^3$ . Определить производительность установки в кмоль/час ( $\Pi_R$ ).

**$\Pi_R = 24,3 \text{ кмоль/час}$ .**

3. В установке, состоящей из двух РИС-н, каждый объёмом  $V_{\text{РИС}1} = V_{\text{РИС}2} = 0,2 \text{ м}^3$ , соединённых последовательно, и отдельного РИС-н объёмом  $V_{\text{РИС}3} = 0,6 \text{ м}^3$ , соединённого с каскадом реактором параллельно, проводится простая необратимая реакция  $A \rightarrow 2R$  с константой скорости  $k = 0,02 \text{ с}^{-1}$ . Объёмный расход исходной смеси, поступающий в установку, равен  $v_0 = 18 \text{ м}^3/\text{час}$ , начальная концентрация вещества А составляет  $C_{A0} = 2,6 \text{ кмоль/м}^3$ . Определить производительность установки в кмоль/час ( $\Pi_R$ ) исходя из условий, что условное время пребывания в обеих ветвях схемы одинаково  $\tau_1 + \tau_2 = \tau_3$ .

**$\Pi_R = 78,2 \text{ кмоль/час}$ .**

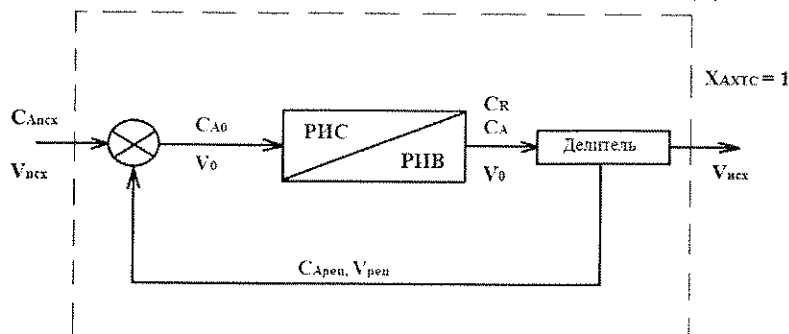
4. В установке, состоящей из РИВ объёмом  $V_{\text{РИВ}} = 50 \text{ л}$  и РИС-н объёмом  $V_{\text{РИС}} = 80 \text{ л}$ , соединённых параллельно, проводится простая необратимая реакция  $A \rightarrow R$  с константой скорости  $k = 0,025 \text{ с}^{-1}$ . Нагрузка установки по веществу А составляет  $\Pi_{A0} = 576 \text{ моль/мин}$ , начальная концентрация вещества А составляет  $C_{A0} = 0,8 \text{ моль/л}$ . Определить производительность установки в кмоль/час ( $\Pi_R$ ) исходя из условий, что исходный объёмный поток делится поровну между реакторами  $v_{01} = v_{02}$ .

**$\Pi_R = 7,56 \text{ кмоль/час}$ .**

5. В установке, состоящей из РИС-н (1ый реактор) объёмом  $V_{\text{РИС}} = 300 \text{ л}$  и РИВ (2ой реактор) объёмом  $V_{\text{РИВ}} = 300 \text{ л}$ , соединённых последовательно, проводится простая необратимая реакция  $2A \rightarrow R$  с константой скорости  $k = 0,1 \text{ м}^3/(\text{кмоль} \cdot \text{с})$ . Объёмный расход исходной смеси, поступающий в установку, равен  $v_0 = 0,6 \text{ м}^3/\text{мин}$ , начальная концентрация вещества А в исходном потоке составляет  $C_{A0} = 0,6 \text{ кмоль/м}^3$ . Определить производительность установки в кмоль/час ( $\Pi_R$ ). Как изменится производительность системы, если РИС-н и РИВ поменять местами?

**$\Pi_{R \text{ РИС-н} \rightarrow \text{РИВ}} = 9,02 \text{ кмоль/час}$ ;  $\Pi_{R \text{ РИВ} \rightarrow \text{РИС-н}} = 9,25 \text{ кмоль/час}$ .**

## РЕАКТОРНАЯ СИСТЕМА С ФРАКЦИОННЫМ РАЗДЕЛЕНИЕМ



$$\begin{cases} \vartheta_{исх} + \vartheta_{рецик} = \vartheta_0 \\ \vartheta_{исх} \cdot C_{A\text{исх}} + \vartheta_{рецик} \cdot C_{A\text{рецик}} = \vartheta_0 \cdot C_{A0} \\ \vartheta_{рецик} \cdot C_{A\text{рецик}} = \vartheta_0 \cdot C_A \end{cases}$$

1. Простая необратимая реакция  $2A \rightarrow R$  проводится в установке, состоящей из смесителя, реактора идеального вытеснения и делительного устройства, в котором продукт R полностью отделяется, а непрореагировавшее вещество A возвращается в реактор. Константа скорости реакции равна  $k = 6 \cdot 10^{-3}$  л/(моль·с). Концентрация вещества A в исходном и рециклическом потоках составляет  $C_{A\text{исх}} = C_{A\text{рецик}} = 2$  моль/л. Степень превращения вещества A в реакторе равна  $x_A = 0,8$ . Производительность системы по продукту R составляет  $\Pi_R = 1,2$  моль/с. Определить объёмный расход рециклического потока ( $v_{рецик}$ ), объём РИВ ( $V_{РИВ}$ ) и нагрузку на реакторную систему ( $\Pi_{A\text{исх}}$ ) в кмоль/час.

$v_{рецик} = 0,3$  л/с;  $V_{РИВ} = 250$  л;  $\Pi_{A\text{исх}} = 8,64$  кмоль/час.

2. Сложная параллельная реакция  $A \rightarrow R$  (1);  $A \rightarrow S$  (2) проводится в установке, состоящей из смесителя, реактора идеального смешения и делительного устройства, в котором продукты R и S полностью отделяются, а непрореагировавшее вещество A возвращается в реактор. Константы скорости целевой и побочной реакций соответственно равны  $k_1 = 2,4$  мин<sup>-1</sup> и  $k_2 = 1,8$  мин<sup>-1</sup>. Концентрация вещества A в исходном и рециклическом потоках составляет  $C_{исх} = C_{рецик} = 4,1$  моль/л. Степень превращения вещества A в реакторе равна  $x_A = 0,65$ . Объёмный расход исходной смеси составляет  $v_{исх} = 210$  л/час. Определить объёмный расход рециклического потока ( $v_{рецик}$ ), объём РИС-н ( $V_{РИС}$ ) и производительность установки по продукту R ( $\Pi_R$ ) в кмоль/час.

$v_{рецик} = 113,1$  л/с;  $V_{РИС} = 2,37$  л;  $\Pi_R = 0,49$  кмоль/час.

3. Сложная последовательная реакция  $A \rightarrow R$  (1);  $R \rightarrow S$  (2) проводится в установке, состоящей из смесителя, реактора идеального смешения и делительного устройства, в котором продукты R и S полностью отделяются, а непрореагировавшее вещество A возвращается в реактор. Константы скорости целевой и побочной реакций соответственно равны  $k_1 = 2,3 \cdot 10^{-3}$  с<sup>-1</sup> и  $k_2 = 0,7 \cdot 10^{-3}$  с<sup>-1</sup>. Объём РИС-н равен  $V_{РИС} = 1200$  л. Концентрация вещества A в исходном потоке составляет  $C_{A\text{исх}} = 0,6$  моль/л. Степень превращения вещества A в реакторе равна  $x_A = 0,64$ . Объёмный расход исходной смеси составляет  $v_{исх} = 1$  л/с. Определить производительность установки по продукту R ( $\Pi_R$ ) в кмоль/час.

$\Pi_R = 1,4$  кмоль/час.

4. Простая необратимая реакция  $A \rightarrow R$  проводится в установке, состоящей из смесителя, реактора идеального смешения и делительного устройства, в котором продукт R полностью отделяется, а непрореагировавшее вещество A возвращается в реактор. Константа скорости реакции равна  $k = 0,06$  с<sup>-1</sup>. Концентрация вещества A в исходном потоке составляет  $C_{A\text{исх}} = 1,4$  моль/л. Степень превращения вещества A в реакторе равна  $x_A = 0,8$ . Объём РИС составляет  $V_{РИС} = 0,2$  м<sup>3</sup>. Производительность установки по продукту R равна  $\Pi_R = 10$  кмоль/час. Определить объёмный расход рециклического потока ( $v_{рецик}$ ) и концентрацию вещества A ( $C_{A\text{рецик}}$ ) в рециклическом потоке.

$v_{рецик} = 1$  л/с;  $C_{A\text{рецик}} = 0,7$  моль/л.

5. Простая необратимая реакция второго порядка  $2A \rightarrow R$  проводится в установке, состоящей из смесителя, реактора идеального смешения и делительного устройства, в котором продукт R полностью отделяется, а непрореагировавшее вещество A возвращается в реактор. Концентрация вещества A в исходном и рециклическом потоках составляет  $C_{A\text{исх}} = C_{A\text{рецик}} = 2,38$  моль/л, концентрация вещества A на выходе из реактора равна  $C_A = 0,92$  моль/л. Объём РИС составляет  $V_{РИС} = 300$  л. Нагрузка на реакторную систему составляет  $\Pi_{A\text{исх}} = 12,15$  кмоль/час. Определить объёмный расход рециклического потока ( $v_{рецик}$ ) и константу скорости химической реакции ( $k$ ).

$v_{рецик} = 0,89$  л/с;  $k = 0,0066$  л/(моль·с).

6. Простая необратимая реакция  $A \rightarrow 2R$  проводится в установке, состоящей из смесителя, реактора идеального вытеснения и делительного устройства, в котором продукт R полностью отделяется, а непрореагировавшее вещество A возвращается в реактор. Константа скорости реакции равна  $k = 0,025$  с<sup>-1</sup>. Концентрация вещества A на выходе из реактора составляет  $C_A = 0,36$  моль/л, что соответствует степени превращения в реакторе  $x_A = 0,4$ . Объём реактора равен  $V_{РИВ} = 75$  л. Концентрация вещества A в исходном потоке  $C_{A\text{исх}} = 0,8$  кмоль/м<sup>3</sup>. Определить объёмный расход рециклического потока ( $v_{рецик}$ ), концентрацию вещества A в рециклическом потоке ( $C_{A\text{рецик}}$ ) и производительность установки по продукту R ( $\Pi_R$ ) в кмоль/час.

$v_{рецик} = 2,57$  л/с;  $C_{A\text{рецик}} = 0,51$  моль/л;  $\Pi_R = 6,34$  кмоль/час.

## ЭЛЕМЕНТЫ ХТС БЕЗ ХИМИЧЕСКОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ

1. На фильтре проходит процесс фильтрации пульпы после сернокислого разложения фосфорита. Процесс идёт по схеме:



Массовый расход пульпы  $G_1 = 1000$  кг/час, отношение твёрдой фазы к жидкой в пульпе – 1:4. В результате процесса отфильтровывается 90 % жидкой фазы. Концентрация фосфорной кислоты в фильтрате составляет 33,5 % масс. **Составить МБ процесса фильтрации.**

На следующей стадии происходит промывка твёрдой фазы от фосфорной кислоты. На выходе получается 12 % масс. кислота, массовое содержание компонентов в твёрдой фазе на выходе с полотна фильтра:  $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O} - 95,4\%$ ;  $\text{H}_3\text{PO}_4 - 0,6\%$ ;  $\text{H}_2\text{O} - 4\%$ . **Определить массовый расход воды, подаваемой на промывку.**

Фосфорная кислота, полученная со стадий фильтрации и промывки, отправляется в смеситель. **Определить массовое содержание фосфорной кислоты в итоговом растворе.**

Приход		Расход	
Компонент	кг/час	Компонент	кг/час
<i>пульпа:</i>	<i>1000</i>	<i><math>\text{H}_3\text{PO}_4</math> разб:</i>	<i>720</i>
$\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	200	$\text{H}_3\text{PO}_4$	241,2
$\text{H}_3\text{PO}_4$	268	$\text{H}_2\text{O}$	478,8
$\text{H}_2\text{O}$	532	<i>тв. фаза</i>	<i>280</i>
		$\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	200
		$\text{H}_3\text{PO}_4$	26,8
		$\text{H}_2\text{O}$	53,2
<b>Σ</b>	1000	<b>Σ</b>	1000

$G_4(\text{H}_2\text{O}) = 142,96$  кг/час;  $\omega_7(\text{H}_3\text{PO}_4) = 0,29$ .

2. Поток воздуха, поступающий в доменную печь, обогащается кислородом в смесителе. Выразить зависимость расхода чистого кислорода  $v_2$  как функцию расхода воздуха  $v_1$ , если объёмная доля кислорода на входе в печь (т.е. на выходе из смесителя) составляет  $\varphi_3 = 0,25$ .

$$v_2 = 0,053 \cdot v_1$$

3. Поток твёрдого сырья расходом 240 кг/час и влажностью 11 % отправляется на сушку. После сушки влажность твёрдого сырья составила 4 %. Определить количество влаги, ушедшее при сушке.

**$G$  (влаги) = 17,5 кг/час.**

4. Сколько 92,5 % серной кислоты и воды нужно смешать, чтобы получить 180 кг 38 % раствора серной кислоты.

**$m(\text{к-та}) = 73,95$  кг;  $m(\text{вода}) = 106,05$  кг.**

5. Объём воздуха  $V = 1000$  л. Объёмная доля кислорода  $\varphi(\text{O}_2) = 0,21$ , азота  $\varphi(\text{N}_2) = 0,79$ . Рассчитать массовые ( $\omega_i$ ) и мольные ( $\chi_i$ ) доли кислорода и азота.

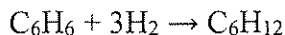
**$\omega(\text{O}_2) = 0,23$ ;  $\omega(\text{N}_2) = 0,77$ ;  $\chi(\text{O}_2) = 0,21$ ;  $\chi(\text{N}_2) = 0,79$ .**

6. Газовая смесь содержит (масс. %):  $\text{H}_2 - 44,9$ ;  $\text{O}_2 - 25,4$ ;  $\text{CO}_2 - 21,9$ ;  $\text{N}_2 - 7,8$ . Масса смеси – 2750 кг. Рассчитать конечный состав смеси в объёмных долях ( $\varphi_i$ ), если удалено 146 м<sup>3</sup>  $\text{CO}_2$  и  $\text{O}_2 - 280$  м<sup>3</sup>, а добавлено 25 кмоль  $\text{CH}_4$ .

**$\varphi(\text{H}_2) = 0,923$ ;  $\varphi(\text{O}_2) = 0,014$ ;  $\varphi(\text{CO}_2) = 0,011$ ;  $\varphi(\text{N}_2) = 0,012$ ;  $\varphi(\text{CH}_4) = 0,037$ .**

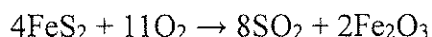
## ЭЛЕМЕНТЫ ХТС С ХИМИЧЕСКИМ ПРЕВРАЩЕНИЕМ

1. Для реакции гидрирования, проводимой при мольном соотношении реагентов  $\text{H}_2:\text{C}_6\text{H}_6 = 5:1$ , степень превращения бензола  $x(\text{C}_6\text{H}_6) = 0,9$ . Рассчитать мольный состав смеси ( $\chi_i$ ), если исходное количество бензола составляет  $N_0(\text{C}_6\text{H}_6) = 8$  моль. Процесс описывается уравнением реакции:



$\chi(\text{C}_6\text{H}_6) = 0,03$ ;  $\chi(\text{H}_2) = 0,70$ ;  $\chi(\text{C}_6\text{H}_{12}) = 0,27$ .

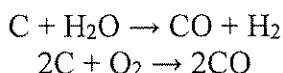
2. Процесс обжига серного колчедана (пирита) проходит по следующему уравнению реакции:



Массовый расход неочищенного пирита равен  $G_0(\text{техн. пирит}) = 1000$  кг/час, массовое содержание чистого  $\text{FeS}_2$  в неочищенном пирите составляет  $\omega(\text{FeS}_2) = 0,62$ . Степень окисления  $\text{FeS}_2$  равна  $x(\text{FeS}_2) = 0,95$ . Коэффициент избытка воздуха составляет  $K_{\text{изб}} = 1,4$  от теоретического количества. Рассчитать объёмный расход воздуха ( $v_0(\text{воздух})$ ) для обжига колчедана, объёмный расход конечного (обжигового) газа ( $v(\text{обжиг. газ})$ ) и состав обжигового газа ( $\phi_i$ ) в об. долях.

$v_0(\text{воздух}) = 2123,52$  м<sup>3</sup>/час;  $v(\text{обжиг. газ}) = 2041$  м<sup>3</sup>/час;  $\phi(\text{SO}_2) = 0,11$ ;  $\phi(\text{O}_2) = 0,07$ ;  $\phi(\text{N}_2) = 0,82$ .

3. Процесс газификации угля описывается следующими уравнениями реакции:

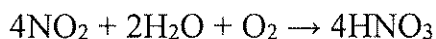
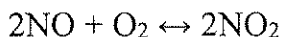
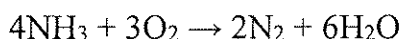


Соотношение водяного пара к воздуху = 1 : 3. Объём паровоздушной смеси равен  $V_{\text{ПВС}} = 1000$  м<sup>3</sup>. Степени превращения воды и кислорода составляют  $x(\text{O}_2) = x(\text{H}_2\text{O}) = 1$ . Рассчитать состав конечного (генераторного) газа в объёмных долях ( $\phi_i$ ).

$\phi(\text{H}_2) = 0,18$ ;  $\phi(\text{CO}) = 0,40$ ;  $\phi(\text{N}_2) = 0,42$ .

4. Определить объёмные расходы аммиака ( $v_0(\text{NH}_3)$ ) и воздуха ( $v_0(\text{воздух})$ ), требуемых для производства  $G(\text{HNO}_3) = 100000$  т/год 100 % азотной кислоты, если цех работает 355 дней в году, выход монооксида азота  $E(\text{NO}) = 0,97$ , степень абсорбции диоксида азота  $\beta(\text{NO}_2) = 0,92$ , содержание аммиака в сухой аммиачно-воздушной смеси  $\omega(\text{NH}_3) = 0,0713$ . Дополнительно в систему подаётся воздух в количестве 9000 м<sup>3</sup>/час.

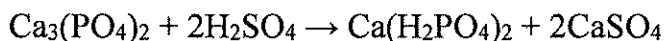
Химическая схема производства:



$v_0(\text{воздух}) = 35705,15$  м<sup>3</sup>/час;  $v_0(\text{NH}_3) = 4676,22$  м<sup>3</sup>/час.

## РАСХОДНЫЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ ПО СЫРЬЮ

1. При обработке 1 т фосфорита, содержащего 62 % масс. фосфата кальция, серной кислотой было получено 727,7 кг суперфосфата (смеси дигидрофосфата кальция и сульфата кальция). Процесс описывается уравнением реакции:

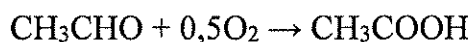
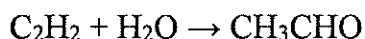


Определить выход суперфосфата и расходные коэффициенты по фосфориту.

**E (суперфосфат) = 0,72;  $K_{\text{пр}} = 1,37$  кг фосфорита / кг суперфосфата;**

**$K_{\text{теор}} = 0,99$  кг фосфорита / кг суперфосфата.**

2. Рассчитать теоретический и практический расходные коэффициенты по природному газу, содержащего 97 % об. метана, в производстве 1 т уксусной кислоты из ацетальдегида. Выход ацетилена из метана составляет 15 % от теоретически возможного, ацетальдегида из ацетилена – 60 %, а уксусной кислоты из ацетальдегида – 90 %. Процесс получения уксусной кислоты из природного газа описывается следующими уравнениями:



**$K_{\text{пр}} = 9,50$  м<sup>3</sup> природного газа / кг уксусной к-ты;**

**$K_{\text{теор}} = 0,77$  м<sup>3</sup> природного газа / кг уксусной к-ты.**

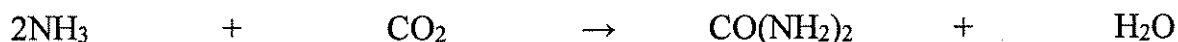
3. Определить теоретический и практический расходные коэффициенты по техническому сульфату натрия на производство 1 кг сульфида натрия. Состав технического  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ : 95 % масс.  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ , остальное – инертные примеси. Состав технического водорода: 97 % об.  $\text{H}_2$ , остальное – азот  $\text{N}_2$  (28 г/моль). Степень превращения сульфата натрия составляет 0,96. Коэффициент избытка водорода – 1,5 относительно теоретически необходимых.



**$K_{\text{пр}} = 2,00$  кг техн.сульфата / кг сульфида натрия;**

**$K_{\text{теор}} = 1,92$  кг техн.сульфата / кг сульфида натрия.**

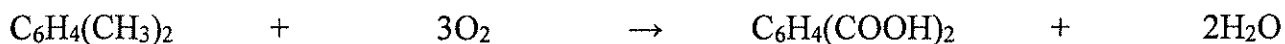
4. Определить теоретический и практический расходные коэффициенты по аммиаку на производство 1 кг мочевины (карбамида). Источником диоксида углерода  $\text{CO}_2$  является газ, содержащий 93 % об.  $\text{CO}_2$ , остальное – азот  $\text{N}_2$  (28 г/моль). Аммиака  $\text{NH}_3$  на получение карбамида было подано в 2 раза больше теоретически необходимого количества.



**$K_{\text{пр}} = 1,13$  кг аммиака / кг карбамида;**

**$K_{\text{теор}} = 0,57$  кг аммиака / кг карбамида.**

5. Определить теоретический и практический расходные коэффициенты по воздуху на производство 1 кг изофталевой кислоты  $C_6H_4(COOH)_2$ . Степень превращения п-ксилола – 0,95. Коэффициент избытка воздуха – 1,4 относительно теоретически необходимого количества. П-ксилол подаётся в виде раствора в уксусной кислоте  $CH_3COOH$  (60 г/моль), содержание п-ксилола в растворе – 57 % масс., остальное –  $CH_3COOH$ .



$K_{пр} = 2,70 \text{ м}^3 \text{ воздуха} / \text{кг изофталевой кислоты};$

$K_{теор} = 1,93 \text{ м}^3 \text{ воздуха} / \text{кг изофталевой кислоты}.$

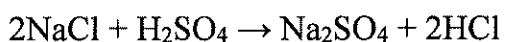
6. В аппарате проходит процесс получения диоксида углерода термическим разложением исходного сырья массой 1 т, содержащего 94 % масс. карбоната кальция, остальное – инертные примеси. Процесс проходит при давлении 1 атм и описывается следующим уравнением реакции:



В результате термического разложения получено  $168 \text{ м}^3$  диоксида углерода. Определить теоретический и практический расходные коэффициенты по исходному сырью и степень превращения карбоната кальция.

$x(CaCO_3) = 0,80; K_{пр} = 5,95 \text{ кг техн. карб.} / \text{м}^3 CO_2; K_{теор} = 4,75 \text{ кг техн. карб.} / \text{м}^3 CO_2.$

7. Процесс получения сульфата натрия из поваренной соли, содержащей 97 % масс. хлорида натрия, и купоросного масла, содержащего 93 % масс. серной кислоты, описывается следующим уравнением реакции:



Степень превращения хлорида натрия – 0,95, степень превращения серной кислоты – 1. Определить теоретический и практический расходные коэффициенты по поваренной соли и купоросному маслу.

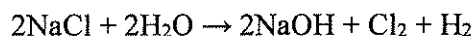
$K_{пр} = 0,89 \text{ кг пов. соли} / \text{кг сульфата}; K_{теор} = 0,85 \text{ кг пов. соли} / \text{кг сульфата};$

$K_{пр} = K_{теор} = 0,74 \text{ кг куп. масла} / \text{кг сульфата}.$



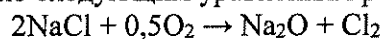
## РАСЧЁТ МАТЕРИАЛЬНЫХ БАЛАНСОВ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

1. Составить материальный баланс электролиза раствора хлорида натрия с концентрацией NaCl 870 г/л и плотностью 1170 г/л, если в результате было получено 1000 м<sup>3</sup> хлора, а степень превращения хлорида натрия составила 0,6. Процесс описывается реакцией:



Приход, кг/час		Расход, кг/час	
NaCl	8704,80	NaCl	3481,92
H <sub>2</sub> O	2995,20	H <sub>2</sub> O	1388,16
		NaOH	3571,2
		Cl <sub>2</sub>	3169,44
		H <sub>2</sub>	89,28
Σ	11700	Σ	11700

2. Составить материальный баланс процесса получения ванадата натрия из хлорида натрия, ванадиевого шлака и воздуха. Процесс проходит в две стадии – получение оксида натрия из хлорида натрия и спекание пятиоксида ванадия и оксида натрия – по следующим уравнениям реакции:



Производительность по ванадату натрия – 1000 кг/час, массовая доля пятиоксида ванадия в ванадиевом шлаке – 0,13, массовое соотношение хлорида натрия и ванадиевого шлака – 1:10, молярное соотношения исходного NaCl и O<sub>2</sub> = 4:1. V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> и Na<sub>2</sub>O прореагировали полностью.

Приход, кг/час		Расход, кг/час	
V <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	746,2	V <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	0
инертн. примеси	4993,80	инертн. примеси	4993,80
NaCl	574	NaCl	94,30
O <sub>2</sub>	78,40	O <sub>2</sub>	12,80
N <sub>2</sub>	258,16	N <sub>2</sub>	258,16
		NaVO <sub>3</sub>	1000
		Cl <sub>2</sub>	291,10
Σ	6650,56	Σ	6650,16

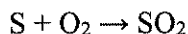
3. Составить материальный баланс процесса окисления аммиака кислородом воздуха. Процесс описывается следующими уравнениями реакции:



Объёмный расход монооксида азота составляет 980 м<sup>3</sup>/час, степень окисления аммиака – 1, селективность процесса по монооксиду азота равна 0,95, объёмная доля аммиака в аммиачновоздушной смеси – 0,09.

Приход, кг/час		Расход, кг/час	
NH <sub>3</sub>	782,85	NH <sub>3</sub>	0
O <sub>2</sub>	3128,96	O <sub>2</sub>	1323,68
N <sub>2</sub>	10299,52	N <sub>2</sub>	10331,72
		NO	1312,50
		H <sub>2</sub> O	1243,44
Σ	14211,33	Σ	14211,34

4. Составить материальный баланс печи для сжигания серы нагрузкой 60 т/сутки по исходной сере. Степень окисления серы 0,95 (остальная сера возгоняется и сгорает вне печи). Коэффициент избытка воздуха – 1,5 от теории. Расчёт вести на производительность печи по сжигаемой сере в кг/ч. Процесс горения серы описывается уравнением:



Приход, кг/час		Расход, кг/час	
S	2500	S	124,96
O <sub>2</sub>	3750	O <sub>2</sub>	1374,96
N <sub>2</sub>	12343,74	N <sub>2</sub>	12343,74
		SO <sub>2</sub>	4750,08
Σ	18593,74	Σ	18593,74

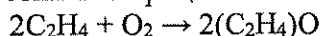
5. На окисление диоксида серы поступает 500 кмоль/ч исходного диоксида. Для окисления используют воздух в стехиометрическом количестве. Степень окисления диоксида серы – 0,8. Процесс описывается уравнением реакции:



Рассчитать материальный баланс процесса.

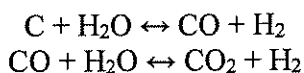
Приход, кг/час		Расход, кг/час	
SO <sub>2</sub>	32000	SO <sub>2</sub>	6400
O <sub>2</sub>	8000	O <sub>2</sub>	1600
N <sub>2</sub>	26333,44	N <sub>2</sub>	26333,44
		SO <sub>3</sub>	32000
Σ	66333,44	Σ	66333,44

6. Составить материальный баланс производства оксида этилена прямым каталитическим окислением этилена воздухом. Состав исходной газовой смеси [% об.]: этилен – 3, воздух – 97. Степень окисления этилена – 0,5. Расчёт вести на 1 т оксида этилена. Процесс описывается уравнением реакции:



Приход, кг/час		Расход, кг/час	
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	1272,88	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	636,44
O <sub>2</sub>	9877,44	O <sub>2</sub>	9513,76
N <sub>2</sub>	32513,60	N <sub>2</sub>	32513,60
		(C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> )O	1000
Σ	43663,92	Σ	43663,80

7. Составить материальный баланс процесса паровой конверсии 1 т кокса, содержащей 97 % масс. угля, остальное – инертные примеси. Процесс описывается следующими уравнениями:

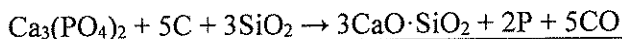


Массовое соотношение кокс : водяной пар = 1:1,8, 10 % мольн. монооксида углерода пошло на побочную реакцию, степень превращения углерода – 0,98.

Приход, кг/час		Расход, кг/час	
C	970	C	19,48
инертн. примеси	30	инерт. примеси	30
H <sub>2</sub> O	1800	H <sub>2</sub> O	231,66
		CO	1996,09
		CO <sub>2</sub>	348,48
		H <sub>2</sub>	174,26
Σ	2800	Σ	2800

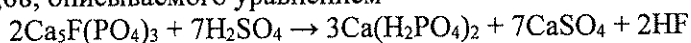
## РАСЧЁТ МАТЕРИАЛЬНЫХ БАЛАНСОВ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

8. Составить материальный баланс получения белого фосфора спеканием технического фосфата кальция с коксом и кремнезёмом. Нагрузка установки по исходному техническому фосфату – 1150 кг/час, массовая доля фосфата кальция в сырье – 0,94, массовая доля углерода в коксе – 0,97 степень превращения фосфата кальция – 0,97, а степени превращения углерода и оксида кремния – 1. Уравнение процесса:



Приход, кг/час		Расход, кг/час	
$\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$	1081	$\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$	30,1
инертн. примеси из фосфата	69	инертн. примеси из фосфата	69
C	203,4	C	0
инертн. примеси из кокса	11,84	инертн. примеси из кокса	11,84
$\text{SiO}_2$	610,2	$\text{SiO}_2$	0
		P	210,18
		$\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$	1179,72
		CO	474,6
$\Sigma$	1975,44	$\Sigma$	1975,44

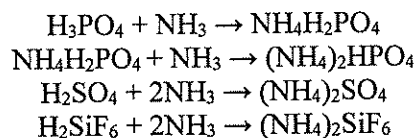
9. Составить материальный баланс процесса сернокислотного разложения апатита раствором  $\text{H}_2\text{SO}_4$  с массовой долей кислоты в растворе 0,68, описываемого уравнением



Нагрузка реактора разложения по апатиту – 1500 кг/час, массовая доля  $\text{Ca}_5\text{F}(\text{PO}_4)_3$  в исходном апатите – 0,96, степень разложения  $\text{Ca}_5\text{F}(\text{PO}_4)_3$  – 0,98, степень превращения серной кислоты – 1.

Приход, кг/час		Расход, кг/час	
$\text{Ca}_5\text{F}(\text{PO}_4)_3$	1440	$\text{Ca}_5\text{F}(\text{PO}_4)_3$	28,8
инертн. примеси	60	инертн. примеси	60
$\text{H}_2\text{SO}_4$	960,4	$\text{H}_2\text{SO}_4$	0
$\text{H}_2\text{O}$	451,95	$\text{H}_2\text{O}$	451,95
		$\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$	982,8
		$\text{CaSO}_4$	1332,8
		HF	56
$\Sigma$	2912,35	$\Sigma$	2912,35

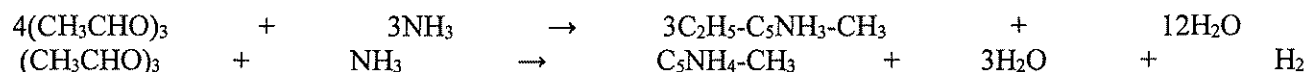
10. Составить материальный баланс получения аммофоса из экстракционной фосфорной кислоты и газообразного аммиака. Получение аммофоса описывается следующими уравнениями реакций:



Расход фосфорной кислоты, поступающий из реактора сернокислого разложения апатита, составляет 420 кг/час. Состав этой кислоты: 39 масс. %  $\text{H}_3\text{PO}_4$ , 2,5 масс. %  $\text{H}_2\text{SO}_4$ , 1,8 масс. %  $\text{H}_2\text{SiF}_6$ , остальное – вода. Реакции (1), (3) и (4) протекают до конца. Выход дигидрофосфата аммония  $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$  составляет 79,5 %. Степень превращения аммиака – 1.

Приход, кг/час		Расход, кг/час	
$\text{H}_3\text{PO}_4$	163,80	$\text{H}_3\text{PO}_4$	0
$\text{H}_2\text{SO}_4$	10,50	$\text{H}_2\text{SO}_4$	0
$\text{H}_2\text{SiF}_6$	7,56	$\text{H}_2\text{SiF}_6$	0
$\text{H}_2\text{O}$	238,14	$\text{H}_2\text{O}$	238,14
$\text{NH}_3$	39,71	$\text{NH}_3$	0
		$\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$	152,81
		$(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$	45,22
		$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$	14,14
		$(\text{NH}_4)_2\text{SiF}_6$	9,35
$\Sigma$	459,71	$\Sigma$	459,66

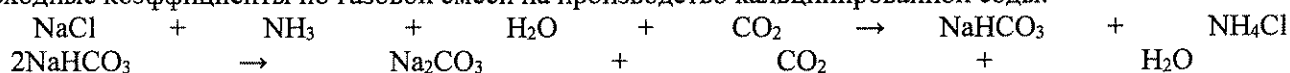
11. Составить материальный баланс производства диалкилпиридина (ДАП)  $C_2H_5-C_5NH_3-CH_3$  методом конденсации паральдегида  $(CH_3CHO)_3$  с аммиаком  $NH_3$ . Пропускная способность установки по аммиачной воде – 3400 кг/час. Состав аммиачной воды: 30 % масс.  $NH_3$ , 70 % масс.  $H_2O$ . Степень превращения аммиака – 0,85. Содержание паральдегида  $(CH_3CHO)_3$  в уксусной кислоте  $CH_3COOH$  (60 г/моль, является растворителем) – 50 % масс. Селективность по ДАП относительно аммиака составляет 85 %. Паральдегид прореагировал полностью. Рассчитать расходные коэффициенты по аммиачной воде на производство ДАП.



Приход, кг/час		Расход, кг/час	
$NH_3$	1020	$NH_3$	153
$H_2O$	2380	$H_2O$	5914,30
$(CH_3CHO)_3$	8639,40	$(CH_3CHO)_3$	0
$CH_3COOH$	8639,40	$CH_3COOH$	8639,40
		$C_2H_5-C_5NH_3-CH_3$	5245,35
		$C_5NH_4-CH_3$	711,45
		$H_2$	15,30
$\Sigma$	20678,80	$\Sigma$	20678,80

$K_{пр} = 0,65$  кг амм.воды / кг ДАП ;  $K_{теор} = 0,49$  кг амм.воды / кг ДАП.

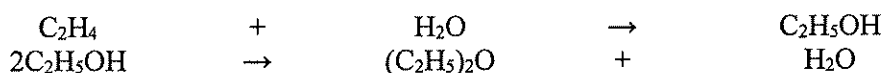
12. Составить материальный баланс производства кальцинированной соды  $Na_2CO_3$  аммиачным способом. Производительность установки по  $Na_2CO_3$  – 10 т/час. Состав исходной реакционной смеси – «рассоля»: 25 масс. % хлорида натрия  $NaCl$ , 8,8 масс. % аммиака  $NH_3$ , 66,2 масс. % воды  $H_2O$ . Состав исходного газового потока: 68 % об. диоксида углерода  $CO_2$ , остальное – азот  $N_2$  (28 г/моль). Конверсия  $CO_2$  – 0,65, конверсия  $NaCl$  – 1. Гидрокарбонат натрия  $NaHCO_3$  на выходе из аппарата в реакционной смеси отсутствует. Рассчитать расходные коэффициенты по газовой смеси на производство кальцинированной соды.



Приход, кг/час		Расход, кг/час	
$NaCl$	11037,78	$NaCl$	0
$NH_3$	3885,30	$NH_3$	677,74
$H_2O$	29228,04	$H_2O$	27529,92
$CO_2$	12772,18	$CO_2$	8621,22
$N_2$	3824,83	$N_2$	3824,83
		$Na_2CO_3$	10000
		$NH_4Cl$	10094,38
$\Sigma$	60748,13	$\Sigma$	60748,09

$K_{пр} = 0,96$  м<sup>3</sup> газ.смеси / кг кальц.соды;  $K_{теор} = 0,62$  м<sup>3</sup> газ.смеси / кг кальц.соды.

13. Составить материальный баланс производства этанола  $C_2H_5OH$  методом гидратации этилена  $C_2H_4$  с избытком воды  $H_2O$ . Производительность по «спирту-сырцу» – 100 кг/час. Состав «спирта-сырца»: 38 % масс.  $C_2H_5OH$ , 4 % масс.  $(C_2H_5)_2O$ , 58 % масс.  $H_2O$ . Степень превращения  $C_2H_4$  – 0,94. Состав газовой смеси, подаваемой на гидратацию: 60 % об.  $C_2H_4$ , остальное – этан  $C_2H_6$  (30 г/моль).



Приход, кг/час		Расход, кг/час	
$C_2H_4$	27,94	$C_2H_4$	1,68
$C_2H_6$	19,96	$C_2H_6$	19,96
$H_2O$	72,94	$H_2O$	58
		$C_2H_5OH$	38
		$(C_2H_5)_2O$	4
$\Sigma$	120,84	$\Sigma$	121,64

$K_{пр} = 0,37$  м<sup>3</sup> газ.смеси / кг спирта-сырца;  $K_{теор} = 0,35$  м<sup>3</sup> газ.смеси / кг спирта-сырца.