

A!

Aalto-yliopisto
Kemian tekniikan
korkeakoulu

CHEM-C2130

Reaktiotekniikka

Kertaus ennen toista välikoetta
Reetta Karinen ja Tiia Viinikainen

HUOM!
Tämä on viimeinen luento!

... nukkukaa huomenna pitkään...

Kurssijärjestelyt

Kurssiin kuuluu

- Teoriaa
- Laskuja
- Palautettavia kotilaskuja
- Quiz-tehtäviä
- 2 välikoetta

- **Arvosteluperusteet**

- Maksimi 90 pistettä
- Läpipääsy 40 pistettä

	pisteitä
Välikokeet (2 x 20 p)	40 p
Kotilaskut (4 x 10 p)	40 p
Quiz-tehtävät (5 x 2 p)	10 p
Kurssin maksimi	90 p

2. Välikoe

pe 11.12.2020 klo 9-12

- MyCourses-työtilassa
- Ei tarvitse ilmoittautua erikseen

Rästivälikoe

Voi suorittaa EXAM-tenttihuoneessa sähköisenä tenttinä

11.12.2020-8.1.2021

- Ilmoittautuminen <https://exam.aalto.fi/>
- Lisätietoja ja toimintaohjeet tenttiin
<https://wiki.aalto.fi/display/OPIT/EXAM>

Mitä mukaan välikokeeseen?

Välikoe MyCoursesissa

- Materiaalia ei rajoitettu
- Laskentaan laskin, Excel ym.
- Kaavakokoelman käyttö suositeltavaa

Rästivälikoe EXAMissa

- henkilöllisyystodistus
- tenttihuoneeseen ei saa viedä itse mitään tarvikkeita eikä vessaan voi lähteä kesken tentin
- Kaavakokoelma jaetaan tehtävien yhteydessä

Hyödyllisiä kaavoja reaktorisuunnitteluun

Konversio:	$X_A = \frac{n_{A0} - n_A}{n_{A0}} \cdot 100\%$	$X_A = \frac{\dot{n}_{A0} - \dot{n}_A}{\dot{n}_{A0}} \cdot 100\%$	suhteena $X_A = \frac{n_{A0} - n_A}{n_{A0}}$
Selektiivisyys:	$S_D = \frac{n_D}{n_{A0} - n_A} \cdot 100\%$	$S_D = \frac{\dot{n}_D}{\dot{n}_{A0} - \dot{n}_A} \cdot 100\%$	
Saanto:	$Y_D = \frac{n_D}{n_{A0}} \cdot 100 = \frac{X_A S_D}{100\%}$	$Y_D = \frac{\dot{n}_D}{\dot{n}_{A0}} \cdot 100\%$	
Reaktiolle:	$aA + bB \rightarrow cC + dD$	$A + \frac{b}{a}B \rightarrow \frac{c}{a}C + \frac{d}{a}D$	
	$\delta = \frac{d}{a} + \frac{c}{a} - \frac{b}{a} - 1$	$\varepsilon = \frac{n_{A0}}{n_{T0}} \left(\frac{d}{a} + \frac{c}{a} - \frac{b}{a} - 1 \right) = y_{A0} \delta$	

Arrheniuksen yhtälö: $k(T) = A e^{\frac{-E}{RT}}$

Ideaalikaasulle:

$$pV = n_T RT \rightarrow V = V_0 \left(\frac{p_0}{p} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right) \left(\frac{n_T}{n_{T0}} \right) \rightarrow \dot{V} = \dot{V}_0 (1 + \varepsilon X_A) \frac{p_0 T}{p T_0}$$

ja $P_i = y_i P_T = C_i RT$, jossa R on kaasuvakio 8,314 (J/mol K)

Konsentraation riippuvuudet:

	Panosreaktori	Virtausreaktori
Konsentraatio	$C_A = \frac{n_A}{V} = \frac{n_{A0}(1 - X_A)}{V}$	$C_A = \frac{\dot{n}_A}{\dot{V}} = \frac{\dot{n}_{A0}(1 - X_A)}{\dot{V}}$
Vakiotilavuus/ tilavuusvirta	$C_A = C_{A0}(1 - X_A)$	$C_A = C_{A0}(1 - X_A)$
Muuttuva tilavuus/ tilavuusvirta	$V = V_0 \left(\frac{p_0}{p} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right) (1 + \varepsilon X_A)$	$\dot{V} = \dot{V}_0 \left(\frac{p_0}{p} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right) (1 + \varepsilon X_A)$
Konsentraatio tilavuuden muuttuessa	$C_A = \frac{C_{A0}(1 - X_A) p T_0}{1 + \varepsilon X_A p_0 T}$	$C_A = \frac{C_{A0}(1 - X_A) p T_0}{1 + \varepsilon X_A p_0 T}$
Komponentille j	$C_j = \frac{C_{A0}(\theta_j + \nu_j X_A) p T_0}{1 + \varepsilon X_A p_0 T}$ $\nu_j =$ reaktion stoikiometrikerroimet	$\theta_j = \frac{n_{j0}}{n_{A0}} = \frac{C_{j0}}{C_{A0}} = \frac{y_{j0}}{y_{A0}}$

Ideaalireaktoreiden mitoitusyhtälöt:

	Differentiaalimuoto	Integraalimuoto	Algebrallinen
Panosreaktori	$n_{A0} \frac{dX_A}{dt} = -r_A V$	$t = n_{A0} \int_{X_{i=0}}^{X_{i=t}} \frac{dX_A}{-r_A V}$	Ei
PFR	$\dot{n}_{A0} \frac{dX_A}{dV} = -r_A$	$V = \dot{n}_{A0} \int_{X_{in}}^{X_{out}} \frac{dX_A}{-r_A}$	Ei
CSTR	Ei	Ei	$V = \frac{\dot{n}_{A0}(X_{out} - X_{in})}{-r_A}$

Tila-aika: $\tau = \frac{V}{V_0}$ $\tau = - \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{-r_A}$ (PFR) $\tau = \frac{V}{V_0} = \frac{C_{A0} - C_A}{-r_A}$ (CSTR)

$[\tau] = s^{-1}$ $\tau = \frac{V_{k0k}}{V_0} = \frac{n}{k} \left[\left(\frac{C_{A0}}{C_{Ain}} \right)^{\frac{1}{n}} - 1 \right]$ (CSTR-kaskadi)

Huom! Pätevät vain, kun tilavuus on vakio!

Energiatase:

$$\dot{Q} - \sum \dot{n}_{i0} \bar{C}_{Pi}(T - T_{in}) - \dot{n}_{A0} \cdot X_A \cdot [\Delta_r H^\circ(T_{ref}) + \Delta C_p(T - T_{ref})] = 0$$

Tasapainovakio reaktiolle $mM \leftrightarrow rR + sS$

$$K_a = \frac{\alpha_R^r \alpha_S^s}{\alpha_M^m} = \frac{Y_R^r Y_S^s p_R^r p_S^s}{Y_M^m p_M^m} = K_Y K_p$$

$$K_c = \frac{C_R^r C_S^s}{C_M^m} \quad K_n = \frac{n_R^r n_S^s}{n_M^m}$$

$$K_a = K_p = K_Y p_{tot}^{\Sigma \nu} = K_c (RT)^{\Sigma \nu} = K_n \left(\frac{p_{tot}(\text{bar})}{n_{tot}} \right)^{\Sigma \nu}$$

missä $\Sigma \nu = r + s - m$ stoikiometriasta

Tasapainossa: $\Delta_r G^\circ = -RT \ln K_a$

van't Hoffin yhtälö: $\ln \frac{K_{a2}}{K_{a1}} = - \frac{\Delta_r H}{R} \left[\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right]$

Hyödyllisiä integraaleja reaktorisuunnitteluun

$$\int_0^x \frac{dx}{1-x} = \ln \frac{1}{1-x}$$

$$\int_0^x \frac{dx}{(1-x)^2} = \frac{x}{1-x}$$

$$\int_0^x \frac{dx}{1+\varepsilon x} = \frac{1}{\varepsilon} \ln(1+\varepsilon x)$$

$$\int_0^x \frac{1+\varepsilon x}{1-x} dx = (1+\varepsilon) \ln \frac{1}{1-x} - \varepsilon x$$

$$\int_0^x \frac{1+\varepsilon x}{(1-x)^2} dx = \frac{(1-\varepsilon)x}{1-x} - \varepsilon \ln \frac{1}{1-x}$$

$$\int_0^x \frac{(1+\varepsilon x)^2}{(1-x)^2} dx = 2\varepsilon(1+\varepsilon) \ln(1-x) + \varepsilon^2 x + \frac{(1+\varepsilon)^2 x}{1-x}$$

$$\int_0^x \frac{dx}{(1-x)(\theta_B - x)} = \frac{1}{\theta_B - 1} \ln \left[\frac{\theta_B - x}{\theta_B(1-x)} \right] \quad \text{kun } \theta_B \neq 1$$

$$\int_0^x \frac{dx}{ax^2 + bx + c} = \frac{-2}{2ax + b} + \frac{2}{b} \quad \text{kun } b^2 = 4ac$$

$$\int_0^x \frac{dx}{ax^2 + bx + c} = \frac{1}{a(p-q)} \ln \left(\frac{q}{p} \cdot \frac{x-p}{x-q} \right) \quad \text{kun } b^2 > 4ac$$

missä p ja q ovat yhtälön $ax^2 + bx + c = 0$ juuret:

$$p, q = \frac{-b \mp \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

$$\int_0^x \frac{a+bx}{c+gx} dx = \frac{bx}{g} + \frac{ag-bc}{g^2} \ln \left(\frac{c+gx}{c} \right)$$

Mitä kysytään...?

Laskuja ja teoriaa

Laskut

- Koetehtävät samantyyppisiä kuin kurssin luentoexamplesimerkit ja laskutehtävät
- Laskutehtävien yhteydessä lisäkysymyksiä
 - Miksi...? Mitä tapahtuisi jos...? Miten parantaisit tätä prosessia..?

Teoriakysymykset

- Erillisiä teoriakysymyksiä

2. välikokeen aihealueet

Teema	
4. Reaktorit ja termodynamiikka	4.1-4.2 Energiatase 4.3 Kemiallinen tasapaino 4.4 Reaktorin mitoitus tasapainoreaktiolle 4.5 Energiatase- ja tasapainolaskuja
5. Reaktionopeus-yhtälön määrittäminen	5.1 Integraali- ja ylimäärämenetelmä 5.2 Differentiaalimenetelmä 5.3-5.4 Reaktiomekanismit 5.5 Reaktorin mitoitus mekanismin avulla

Energiatase

$$\Delta_r H(T)$$

$$\dot{Q} - \sum \dot{n}_{i0} \cdot \bar{C}_{Pi} \cdot (T - T_{in}) - \dot{n}_{A0} \cdot X_A \cdot [\Delta_r H^0(T_{ref}) + \Delta C_p \cdot (T - T_{ref})] = 0$$

\dot{Q} Reaktorin jäähdytys- tai lämmitystarve

\dot{n}_{i0} Komponentin i moolivirta syötössä

\bar{C}_{Pi} Komponentin i lämpökapasiteetti

T_{in} Syöttölämpötila

T Reaktorin lämpötila = tuotteen lämpötila

\dot{n}_{A0} Reagoivan komponentin A moolivirta syötössä

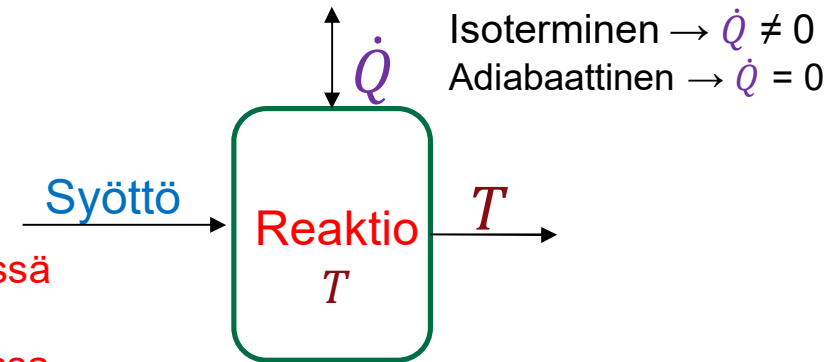
X_A Reagoivan komponentin A konversio

$\Delta_r H^0(T_{ref})$ Reaktion entalpia referenssilämpötilassa

ΔC_p Lämpökapasiteetin muutos reaktiossa

$$\left. \begin{aligned} \Delta_r H^0 &= \Delta_f H^0(\text{tuotteet}) - \Delta_f H^0(\text{lähtöaineet}) \\ \Delta C_p &= C_p(\text{tuotteet}) - C_p(\text{lähtöaineet}) \end{aligned} \right\} \text{Reaktion stoikiometriset kertoimet huomioitava!}$$

T_{ref} Referenssilämpötila



Välikokeessa voidaan pyytää laskemaan esim.

- reaktorin lämmitys/jäähdytystarpeen määrä
- lämpötila, johon reaktori asettuu toimimaan
- tarvittava reaktorin tilavuus, kun konversio tai reaktorin lämpötila lasketaan ensin energiataseen avulla

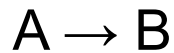
Tasapaino

Tasapainosta on hyvä osata ainakin seuraavat:

- **Tasapainovakion määrittäminen termodynaamisesta datasta tai kokeellisista tuloksista**
- **Tasapainovakion lämpötilariippuvuus**
- **Tasapainokonversion laskeminen**
- **Reaktorin mitoitus tasapainorajoitteiselle reaktiolle**

Reaktionopeusyhtälö kokeellisesti

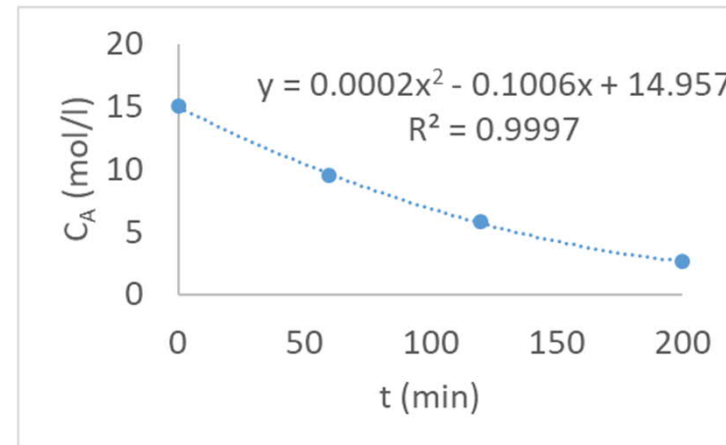
Nestefaasireaktiota



tutkittiin panosreaktorissa
mittaamalla lähtöaineen
konsentraatiota (mol/dm^3)
ajan (min) funktiona.

Määritä reaktionopeusyhtälö
ja reaktionopeusvakion arvo
sekä yksikkö.

t (min)	C_A (mol/dm^3)
0	15
60	9,5
120	5,8
200	2,6



Vastaukset:

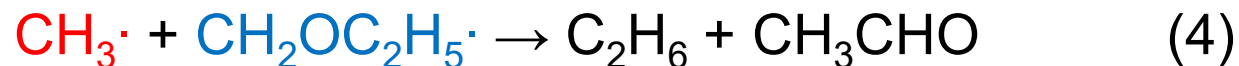
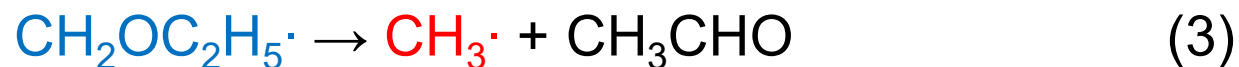
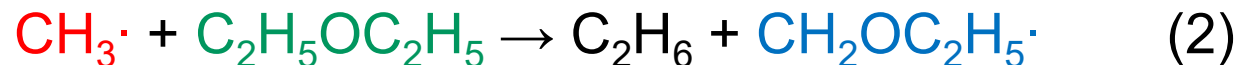
- Integraalimenetelmällä $n = 1$ ja $k \approx 0,009$
- Differentiaalimenetelmällä $n \approx 0,9$ ja $k \approx 0,011$

Reaktionopeusyhtälö mekanismista

Dietyylieetterin hajoamisreaktiolle



on esitetty seuraavaa mekanismia:



Osoita, että dietyylieetterin hajoaminen noudattaa alkeisreaktion kinetiikkaa.

Millaisia laskuja tentissä voisi olla...

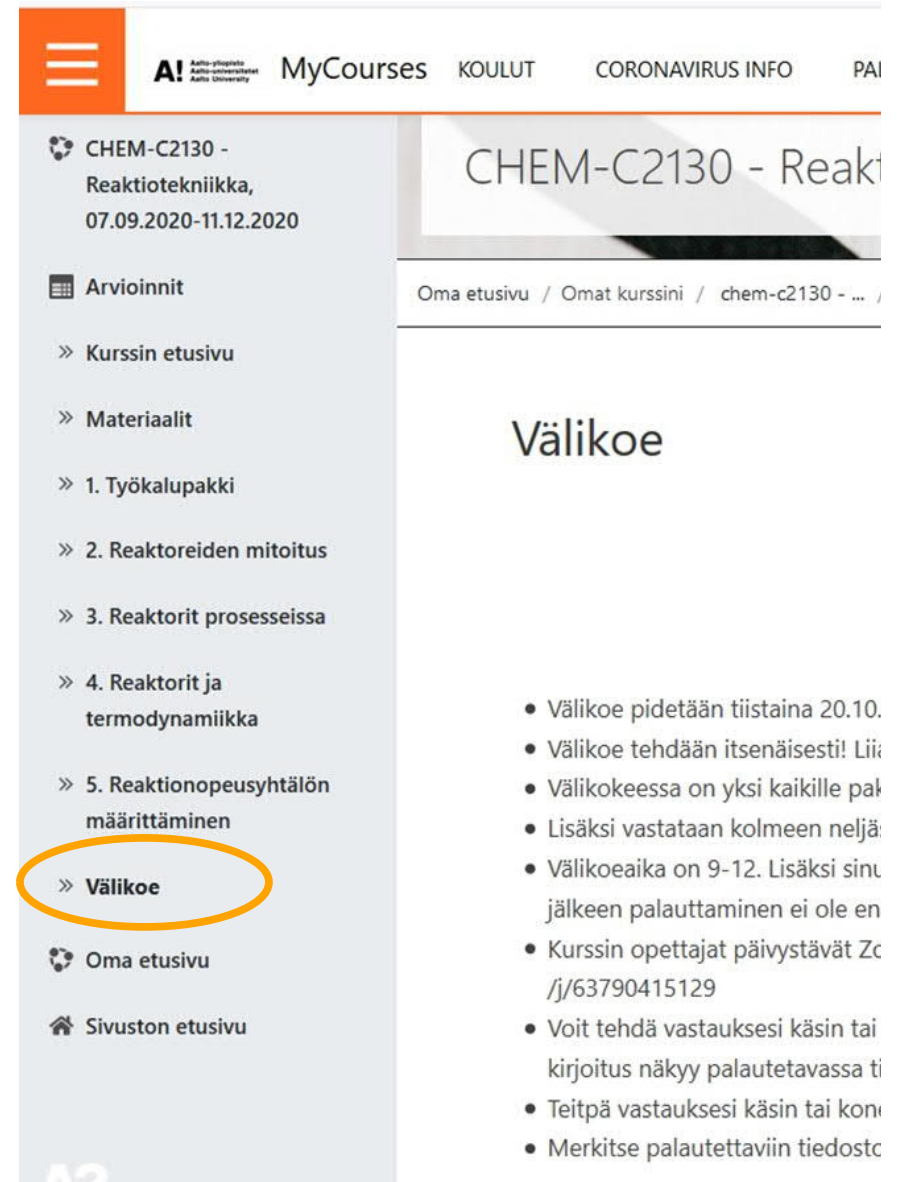
- Jotain vinkkejä edellisillä kalvoilla
- Laskut eivät ole niin pitkiä ja monimutkaisia kuin kotilasku!
- Aiheet samoja kuin laskareissa, mutta laskut eivät ole suoraan kurssimateriaalista
- Tehtävät sisältävät usein jotain selittämistä:
 - miksi näin tapahtuu tai mitä kannattaisi tehdä toisin ym...
- Muistakaa mitoituksen askelmerkit!

Reaktorimitoituksen askelmerkit

1. Valitaan mitoitussyhtälö sen mukaan, millainen reaktori on käytössä
2. Määritetään reaktionopeuslauseke
3. Lausutaan reaktionopeuslausekkeen konsentraatiot konversion funktiona. Mietitään, onko kyseessä reaktio, jossa tilavuus muuttuu – vaikuttaa konversion lausekkeeseen!
4. Yhdistetään kohtien 1-3 reaktiot ja ratkaistaan kysytty suure (aika, tilavuus, konsentraatio...)

MyCourses-välikoe

- MC-työtilassa osio Välikoe
- Ohjeita kokeeseen nyt jo näkyvillä



AI Aalto-yliopisto
Aalto University

MyCourses KOULUT CORONAVIRUS INFO PAI

CHEM-C2130 -
Reaktiotekniikka,
07.09.2020-11.12.2020

Arvioinnit

- » Kurssin etusivu
- » Materiaalit
- » 1. Työkalupakki
- » 2. Reaktoreiden mitoitus
- » 3. Reaktorit prosesseissa
- » 4. Reaktorit ja termodynamiikka
- » 5. Reaktiionopeusyhtälön määrittäminen
- » **Välikoe**
- » Oma etusivu
- » Sivuston etusivu

CHEM-C2130 - Reakt

Oma etusivu / Omat kurssini / chem-c2130 - ...

Välikoe

- Välikoe pidetään tiistaina 20.10.
- Välikoe tehdään itsenäisesti! Lii
- Välikokeessa on yksi kaikille pak
- Lisäksi vastataan kolmeen neljä
- Välikoeaika on 9-12. Lisäksi sinu jälkeen palauttaminen ei ole en
- Kurssin opettajat päivystävät Zc /j/63790415129
- Voit tehdä vastauksesi käsin tai kirjoitus näkyy palautetavassa ti
- Teitpä vastauksesi käsin tai kon
- Merkitse palautettavaan tiedoste

MyCourses-välikoe, ohjeita

- Välikoe pidetään perjantaina 11.12.2020 klo 9-12. Tehtävät tulevat näkyviin tentin alkaessa.
- Välikoe tehdään itsenäisesti! Liian samanlaisia vastauksia käsitellään tenttivilppinä.
- Välikokeessa on yksi kaikille pakollinen tehtävä.
- Lisäksi vastataan kahteen kolmesta tehtävästä. Jos vastaat kaikkiin tehtäviin, huonoin jää pois arvioinnista
- Välikoeaika on 9-12. Lisäksi sinulla on aikaa klo 12:30 asti koostaa ja palauttaa vastauksesi tiedostoina palautuslaatikkoon. Puoli yhden jälkeen palauttaminen ei ole enää mahdollista, ellei sinulle ole myönnetty henkilökohtaista lisäaikaa.

MyCourses-välikoe, ohjeita

- Kurssin opettajat päivystävät Zoomissa kokeen ajan. Jos sinulle tulee jotain kysymyksiä tai ongelmia, ota zoom-yhteys <https://aalto.zoom.us/j/63790415129>
- Voit tehdä vastauksesi käsin tai koneella. Käsinkirjoitetut paperit valokuvataan ja koostetaan tiedostoksi. Tarkista, että käsiala on selkeää, ja kirjoitus näkyy palautetavassa tiedostossa selvästi. Tarkista myös, että vastauksessasi on kaikki sivut mukana!
- Teitpä vastauksesi käsin tai koneella, kannattaa laittaa välivaiheita näkyviin.
- Merkitse palautettaviin tiedostoihin selvästi, mistä tehtävästä on kysymys.