ХИМИЧЕСКАЯ РЕАКЦИЯ В ПОТОКЕ В ОДНОМЕРНОМ СЛУЧАЕ. УРАВНЕНИЕ НЕРАЗРЫВНОСТИ

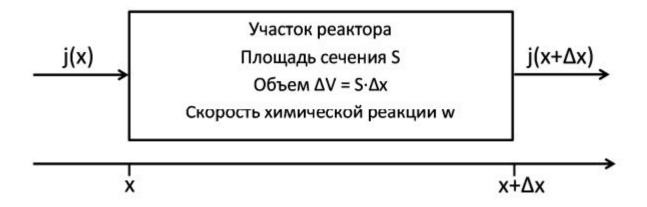


Схема участка трубчатого реактора для вывода уравнения неразрывности.

Запишем уравнение баланса количества вещества:

$$\binom{\text{Суммарное}}{\text{изменение}} = \binom{\text{Изменение за}}{\text{счет хим. реакции}} + \binom{\text{Вошло с}}{\text{потоком}} - \binom{\text{Вышло с}}{\text{потоком}}.$$
 $[C(\tilde{x}, t+\Delta t) - C(\tilde{x}, t)] \cdot \Delta V = w \cdot \Delta V \cdot \Delta t + j(x) \cdot S \cdot \Delta t - j(x+\Delta x) \cdot S \cdot \Delta t.$

Произведем переход к бесконечно малым величинам:

Уравнение неразрывности – основное уравнение диффузионной кинетики

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} + w.$$

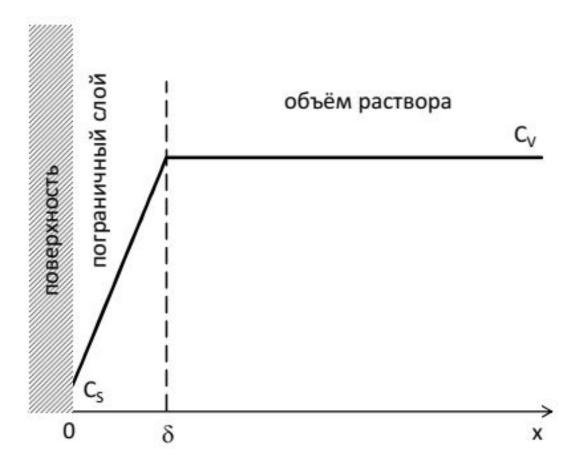
стационарный случай
$$(\frac{\partial c}{\partial t} = 0),$$
 $D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} + w = 0.$

ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО ДИФФУЗИОННОГО МАССОПЕРЕНОСА НА СКОРОСТЬ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ МЕТОД РАВНОДОСТУПНОЙ ПОВЕРХНОСТИ

$$j_D = \beta \cdot (C_V - C_S),$$

согласно которому диффузионный поток пропорционален разности концентраций. Величина β, м/с, называется коэффициентом массопереноса (коэффициентом массопередачи, константой скорости диффузии).

	Быстрая поверхностная	Медленная поверхностная
	реакция, $C_S \approx 0$	реакция, $C_S \approx C_V$
	ДИФФУЗИОННАЯ	КИНЕТИЧЕСКАЯ
	ОБЛАСТЬ	ОБЛАСТЬ
Лимитирующая стадия	Диффузия	Химическая реакция
Скорость реакции	$\omega = \beta \cdot C_V$	$\omega = \kappa \cdot (C_V)^n$
Кажущийся порядок	1	n
Эффективная константа	β	κ



Модель распределения концентрации реагента около гладкой реакционной поверхности.

ВЫРАЖЕНИЕ СКОРОСТИ ПОВЕРХНОСТНОЙ РЕАКЦИИ

скорость поверхностной химической реакции

$$\omega = \kappa (Cs)^n$$

I) А (в газовой фазе) +
$$\Omega$$
 (центр адсорбции) \rightleftarrows А Ω (адсорбированный реагент) поверхностная концентрация концентрация сонцентрация $(a_m - a)$, моль/ M^2 a , моль/ M^2 a

II) $A\Omega \rightarrow \Pi$ родукты (в газовой фазе) + Ω .

$$K_I = \frac{a}{c_S(a_m - a)},$$

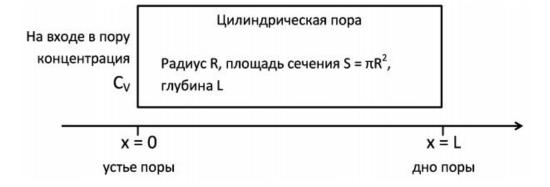
уравнение изотермы адсорбции Ленгмюра

$$a = \frac{K_I a_m C_S}{1 + K_I C_S}$$

$$\omega = \kappa_{II}a, \quad \omega = \frac{\kappa_{II}\kappa_{I}a_{m}c_{S}}{1+\kappa_{I}c_{S}}$$

ДИФФУЗИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ РЕАКЦИЯ В ПОРИСТОМ КАТАЛИЗАТОРЕ. ВНУТРИДИФФУЗИОННАЯ ОБЛАСТЬ

РЕАКЦИЯ В ПОРЕ КАТАЛИЗАТОРА



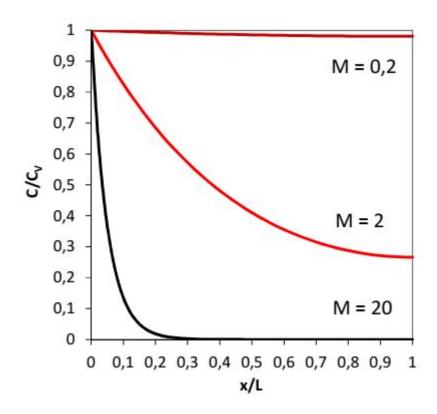
уравнение стационарной диффузионной кинетики

$$D\frac{d^2C}{dx^2} = \frac{2\kappa}{R}C^n.$$

Граничные условия следующие: $C|_{x=0} = C_V$ (концентрация вещества около устья поры равна концентрации в объёме), $\frac{dC}{dx}\Big|_{x=L} = 0$ (отсутствует поток вещества на дне поры).

$$M = \sqrt{\frac{2\kappa}{RD}} L.$$

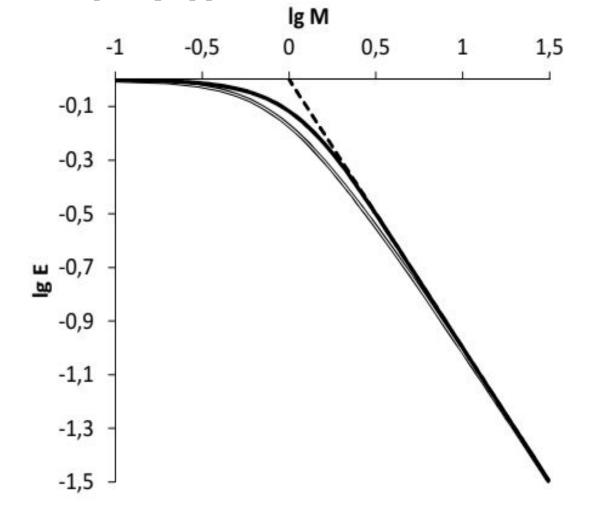
ФАКТОР ДИФФУЗИОННОГО ТОРМОЖЕНИЯ



Зависимости концентрации реагента внутри поры от расстояния от устья при разных значениях параметра Тиле М.

ФАКТОР ДИФФУЗИОННОГО ТОРМОЖЕНИЯ (фактор эффективности)

$$E = \frac{1}{M} \frac{e^M - e^{-M}}{e^M + e^{-M}} = \frac{\tanh(M)}{M}.$$



Зависимости фактора диффузионного торможения E от параметра Тиле M в логарифмических координатах. Сплошная линия — для реакции 1-го порядка в поре; двойная линия — для реакции 1-го порядка в сферической грануле; пунктир — зависимость E = 1/M.

НАБЛЮДАЕМАЯ СКОРОСТЬ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ

два подхода к расчету величины W

1. Если известно распределение C(x) концентрации реагента вдоль поры, то скорость можно найти согласно выражению

2. В установившемся стационарном режиме, скорость W с точностью до переводного множителя равна диффузионному потоку jD через устье поры,

$$W = \frac{\int_0^L \kappa C(x) 2\pi R dx}{\pi R^2 L} = \frac{2\kappa}{RL} \int_0^L C(x) dx.$$

$$W = \frac{2\kappa}{R} \frac{1}{M} \frac{e^M - e^{-M}}{e^M + e^{-M}} C_V,$$

$$W = \frac{2\kappa}{R} E C_V.$$

$$K_{3\phi} = \frac{MD}{L^2} \frac{e^M - e^{-M}}{e^M + e^{-M}} = \frac{2\kappa}{R} \frac{1}{M} \frac{e^M - e^{-M}}{e^M + e^{-M}} = \frac{2\kappa}{R} E.$$