

**ХИМИЧЕСКАЯ РЕАКЦИЯ В ПОТОКЕ В ОДНОМЕРНОМ СЛУЧАЕ.
УРАВНЕНИЕ НЕРАЗРЫВНОСТИ**

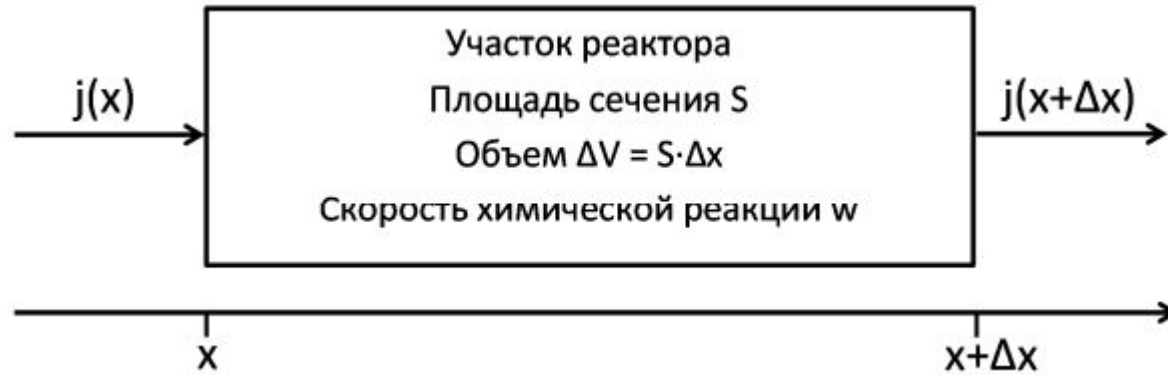


Схема участка трубчатого реактора для вывода уравнения неразрывности.

Запишем уравнение баланса количества вещества:

$$\begin{aligned} \left(\begin{array}{c} \text{Суммарное} \\ \text{изменение} \end{array} \right) &= \left(\begin{array}{c} \text{Изменение за} \\ \text{счет хим. реакции} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{Вошло с} \\ \text{потоком} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{Вышло с} \\ \text{потоком} \end{array} \right). \\ [C(\tilde{x}, t+\Delta t) - C(\tilde{x}, t)] \cdot \Delta V &= w \cdot \Delta V \cdot \Delta t + j(x) \cdot S \cdot \Delta t - j(x+\Delta x) \cdot S \cdot \Delta t. \end{aligned}$$

Произведем переход к бесконечно малым величинам:

$$\begin{aligned} \Delta x &\rightarrow dx, & \Delta V &\rightarrow dV = Sdx, & \Delta t &\rightarrow dt, \\ C(\tilde{x}, t+\Delta t) - C(\tilde{x}, t) &\rightarrow \frac{\partial C}{\partial t} dt, & j(x,t) - j(x+\Delta x,t) &\rightarrow -\frac{\partial j}{\partial x} dx. \end{aligned}$$

*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 $\left(\frac{\partial C}{\partial t} = 0 \right),$

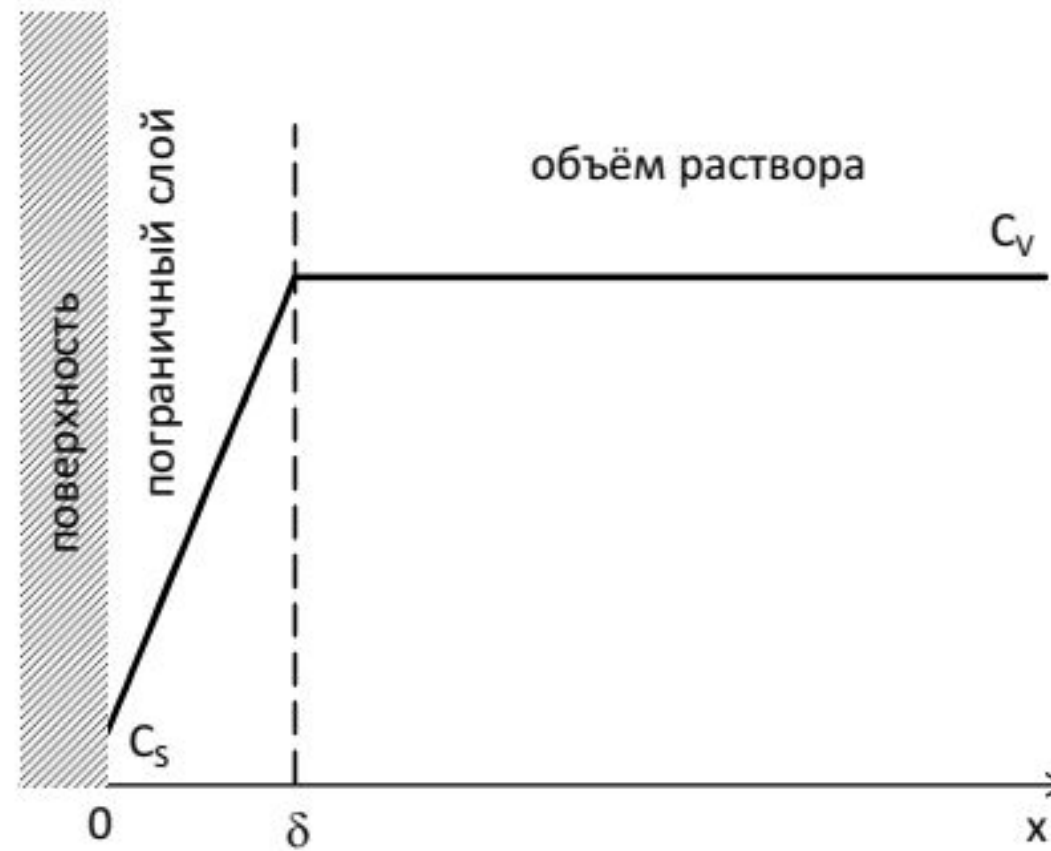
$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} + w = 0.$$

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

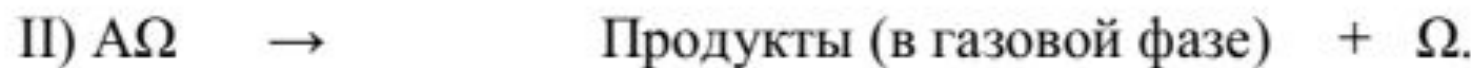
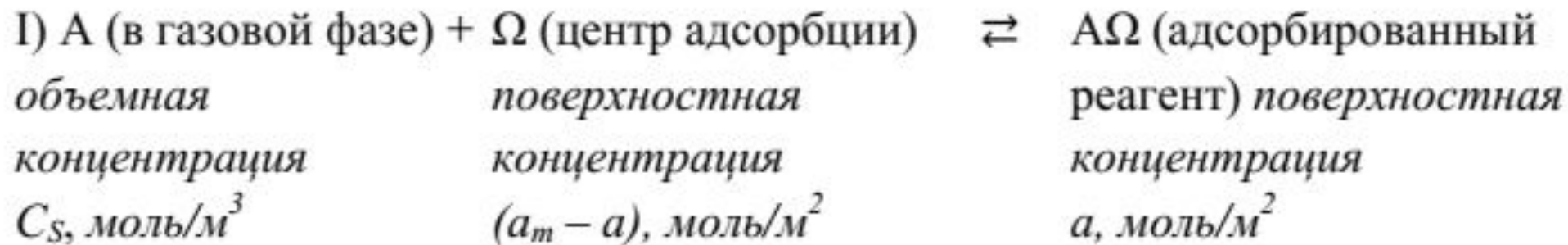


Модель распределения концентрации реагента около гладкой реакционной поверхности.

ВЫРАЖЕНИЕ СКОРОСТИ ПОВЕРХНОСТНОЙ РЕАКЦИИ

скорость поверхностной химической реакции

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



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

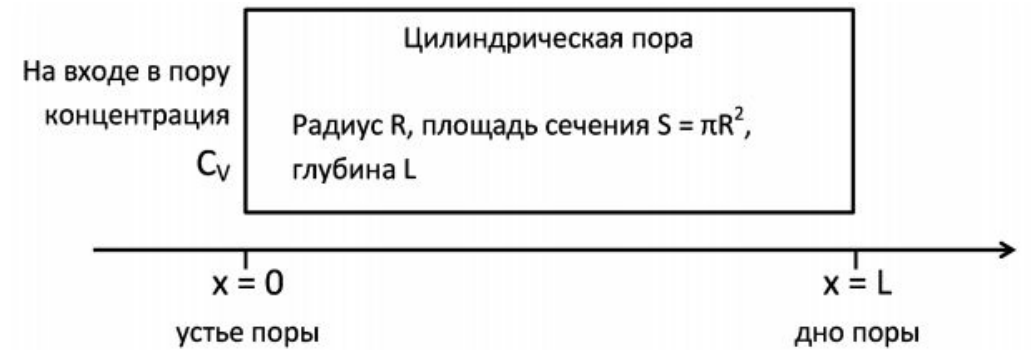
уравнение изотермы адсорбции Ленгмюра

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

Скорость мономолекулярной поверхностной реакции

$$\omega = \kappa_{II} a, \quad \omega = \frac{\kappa_{II} K_I a_m C_S}{1 + K_I C_S}$$

ДИФФУЗИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ РЕАКЦИЯ В ПОРИСТОМ КАТАЛИЗАТОРЕ. ВНУТРИДИФФУЗИОННАЯ ОБЛАСТЬ РЕАКЦИЯ В ПОРЕ КАТАЛИЗАТОРА



уравнение стационарной диффузионной кинетики

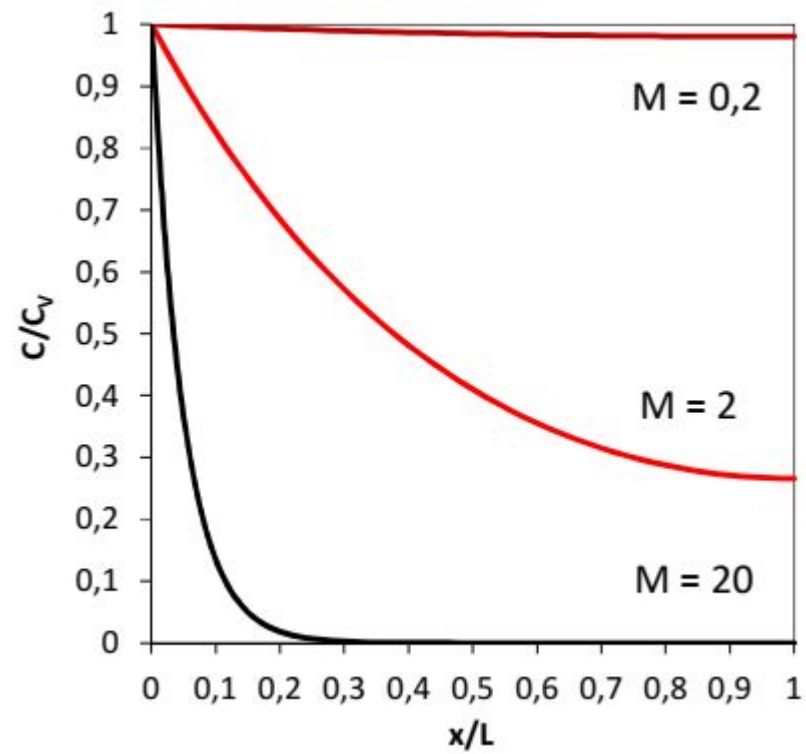
$$D \frac{d^2 C}{dx^2} = \frac{2\kappa}{R} C^n.$$

Граничные условия следующие: $C|_{x=0} = C_V$ (концентрация вещества около устья поры равна концентрации в объёме), $\frac{dC}{dx}|_{x=L} = 0$ (отсутствует поток вещества на дне поры).⁹

параметр Тиле (модуль Тиле)

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

ФАКТОР ДИФФУЗИОННОГО ТОРМОЖЕНИЯ

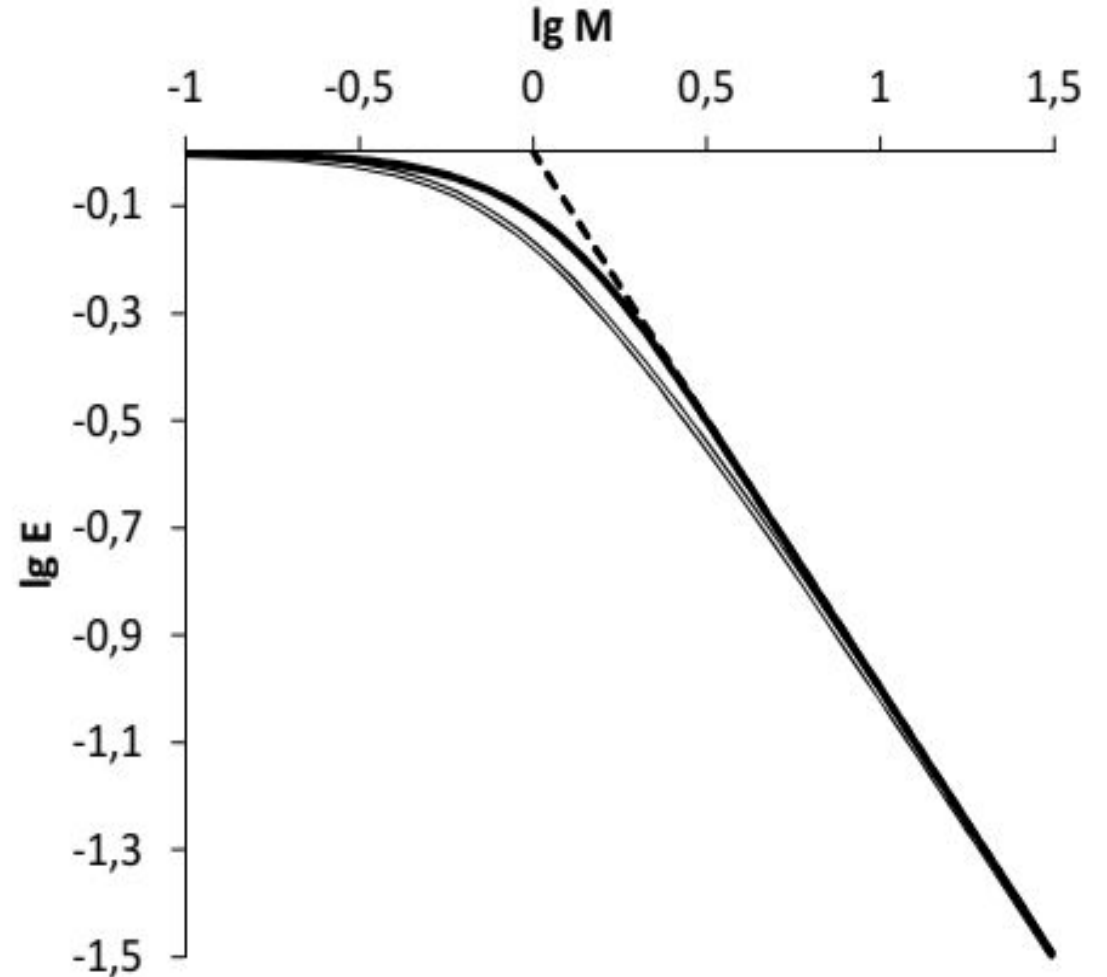


Зависимости концентрации реагента внутри поры от расстояния от устья при разных значениях параметра Тиле M .

ФАКТОР ДИФФУЗИОННОГО ТОРМОЖЕНИЯ (фактор эффективности)

$$E = \frac{\text{действительная скорость}}{\text{гипотетическая максимальная скорость в отсутствии диффузии}} = \frac{\int_0^L \kappa C(x) 2\pi R dx}{\kappa C_V 2\pi RL} = \frac{\int_0^L C(x) dx}{C_V L}$$

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



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

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

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

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

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

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