

# Основные требования к химическим реакторам

1. Максимальная производительность
2. Максимальная степень превращения реагента
3. Максимальная селективность (избирательность)
4. Устойчивость процесса и его управляемость
5. Возможность длительной непрерывной работы
6. Минимальные энергетические затраты

Основной критерий – экономический, который сводит все показатели к их оптимальным значениям.

# Характеристики системы

## □ Степень превращения

Для  $i$  – исходного реагента степень его превращения равна  
( при протекании реакции без изменения объема )

$$\text{или } \frac{N_{0i} - N_i}{N_{0i}} = \frac{c_{0i} - c_i}{c_{0i}}$$

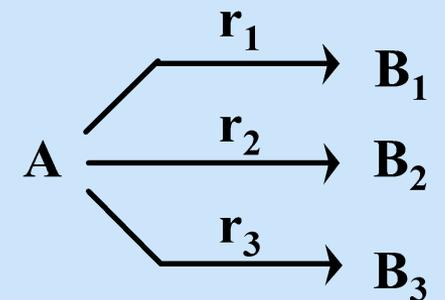
$x_1$  - ключевое вещество

$$\frac{N_{01} x_1}{\nu_1} = \frac{N_{0i} x_i}{\nu_i}; \quad x_i = \frac{\nu_i}{\nu_1} \frac{N_{01}}{N_{0i}} x_1 = \frac{\nu_i}{\nu_1} \frac{c_{01}}{c_{0i}} x_1;$$

$$c_i = c_{0i} - \frac{\nu_i}{\nu_1} c_{01} x_1$$

# Характеристики каталитической системы

## □ Селективность (для сложных реакций)

Последовательная схема	Параллельная схема
$A \xrightarrow{r_1} B \xrightarrow{r_2} C$	
Целевой продукт - B	Целевой продукт - B <sub>1</sub>

- **Дифференциальная селективность (избирательность) реакции** в элементе реактора равна отношению скорости образования целевого продукта к суммарной скорости превращения исходного реагента –

$$S = \frac{\sum_{j=1}^m r_j}{\sum_{i=1}^n r_i}$$

$n$  - число маршрутов расходования исходного реагента

$m$  - число маршрутов, по которым образуется либо расходуется целевой продукт

$$S_{\text{носл}} = (r_1 - r_2) / r_1 \qquad S_{\text{нар}} = r_1 / (r_1 + r_2 + r_3)$$

# Характеристики каталитической системы

- **Интегральная селективность** процесса равна отношению количества целевого продукта на выходе из реактора к количеству превращенного исходного реагента

$$S = \frac{c_{B_i}}{c_A^0 - c_A}$$

$$S_{\text{посл}} = c_B / (c_A^0 - c_A) \quad S_{\text{нар}} = c_{B_1} / (c_A^0 - c_A)$$

- ▣ **Выход целевого продукта** - доля исходного реагента, превратившегося при прохождении всего слоя катализатора в целевой продукт:

$$E = \frac{c_{B_i}}{c_A^0} = S \cdot x$$

- ▣ **Время контакта** - отношение объема катализатора к объемной скорости подачи реакционной смеси:

$$\tau = \frac{V}{W} [ \text{сек} ]$$

# Характеристики каталитической системы

- **Мощность** - количество продукта, произведенное в реакторе за год (для многотоннажных продуктов **10-100 тыс. тонн в год** )
- **Производительность** единицы объема реакционного пространства (или единицы веса катализатора)

$$A = \frac{W c_o S x}{V} = \frac{c_o E}{\tau} \quad \left[ \frac{\text{kg}}{l_{cat} \text{ h}} \right]$$

В настоящее время реализация процесса может быть перспективна, если достигается производительность

$$A \geq 0.1 \quad \left[ \frac{\text{kg}}{l_{cat} \text{ h}} \right]$$

# Характеристики каталитической системы

## ▣ Адиабатический разогрев

$$\Delta T_{ad} = \frac{Q c_o x}{c_p}$$

$Q$  – теплота реакции, дж/моль

$c_o$  – концентрация реагента на входе в реактор, моль/м<sup>3</sup>

$x$  – степень превращения реагента

$c_p$  – теплоемкость газовой смеси

**Для адиабатического слоя катализатора**

$$T_{out} = T_{in} + \Delta T_{ad}$$

# Математические модели лабораторных реакторов

$$T = \text{const}$$

- *Реактор периодического действия (batch reactor)*

$$\frac{d c_i}{d t} = r_i$$

## Проточные реакторы

- *Реакторы идеального вытеснения (plug flow reactor)*

$$\frac{d c_i}{d z} = r_i$$

- *Реактор идеального смешения (continuous stirred tank reactor)*

$$\frac{c_i - c_{i0}}{\tau} = r_i$$

• **Основные характеристики :**

- активность
- селективность
- стабильность

• **Характеристики активности**

- **X** - степень превращения исходного реагента при одинаковых реакционных условиях
- **T** - время контакта при постоянных составе реакционной смеси и степени превращения исходного реагента;
- **k** - константа скорости реакции

$$r = k c$$

**РИВ:**  $\frac{d c}{d \tau} = -k c, \quad \frac{d x}{d \tau} = k (1 - x), \quad x = 1 - e^{-k \tau}, \quad k = -\ln(1 - x) / \tau$

**РИС:**  $\frac{c - c_0}{\tau} = -k c, \quad \frac{x}{\tau} = k (1 - x), \quad x = \frac{k \tau}{1 + k \tau}, \quad k = \frac{x}{(1 - x) \tau}$