

سیتتیک و طرح راکتورهای شیمیایی

۱. در واکنش $A \xrightleftharpoons[S]{R}$ رابطه $\phi\left(\frac{R}{A}\right) = 0.1 + 0.01C_A$ برقرار است. اگر غلظت خوراک ورودی به یک راکتور مخلوط شونده پیوسته $C_{Ao} = 10 \frac{\text{mol}}{\text{lit}}$ باشد، حداکثر محصول R قابل تولید در این راکتور چند مول بر لیتر است؟

(۱) 2 (۲) 1.5 (۳) 1 (۴) 0.5

۲. واکنش $A + B \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} R$ به معادله سرعت $-r_A = k_1 C_A C_B - k_2 C_R$ در یک راکتور ناپیوسته انجام می‌شود. $C_{Ao} = C_{Bo} = 1 \frac{\text{mol}}{\text{lit}}$ و غلظت A در حالت تعادل $0.5 \frac{\text{mol}}{\text{lit}}$ است. اگر $C_A = 0.6 \frac{\text{mol}}{\text{lit}}$ باشد، سرعت واکنش $-r_A = 0.16 \frac{\text{mol}}{\text{lit} \cdot \text{min}}$ است. ثابت‌های سرعت k_1 و k_2 کدام است؟

(۱) $k_1 = 3 \frac{\text{lit}}{\text{mol} \cdot \text{min}}$, $k_2 = 1.5 \text{ min}^{-1}$ (۲) $k_1 = 1 \text{ min}^{-1}$, $k_2 = 0.5 \text{ min}^{-1}$

(۳) $k_1 = 2 \frac{\text{lit}}{\text{mol} \cdot \text{min}}$, $k_2 = 1 \text{ min}^{-1}$ (۴) $k_1 = 0.5 \frac{\text{lit}}{\text{mol} \cdot \text{min}}$, $k_2 = 0.25 \text{ min}^{-1}$

۳. ماده R در یک راکتور مخلوط شونده پیوسته طبق واکنش $A \rightarrow R$ تولید می‌شود. هم‌زمان با این واکنش دو واکنش دیگر $A \rightarrow T$, $A \rightarrow S$ نیز صورت می‌گیرد، که مواد ناخواسته S و T تولید می‌شوند. در صورتی که غلظت ماده اولیه A این واکنش‌ها را افزایش دهیم، چه تاثیری بر روی راندمان محصول R خواهد گذاشت. اگر هر سه واکنش ابتدایی باشند؟

- (۱) درصد تولید R افزایش و درصد تولید S و T ثابت خواهد ماند.
 (۲) درصد تولید R کاهش و درصد تولید S و T ثابت خواهد ماند.
 (۳) تاثیری بر درصد تولید R نخواهد گذاشت.
 (۴) درصد تولید R کاهش و درصد تولید S و T افزایش می‌یابد.

۴. واکنش گازی درجه صفر $A \rightarrow 4R + B$ با خوراک A خالص و فشار اولیه 3 اتمسفر انجام می‌شود. ثابت سرعت واکنش $k = 0.1 \frac{\text{atm}}{\text{min}}$ است. اگر حجم ثابت باشد فشار سیستم بعد از 10 دقیقه چند اتمسفر خواهد شد؟

(۱) 12.5 (۲) 3.5 (۳) 4.5 (۴) 7

۵. واکنش فاز مایع درجه دوم $2A \rightarrow B$ در یک راکتور ناپیوسته انجام می‌گیرد. اگر در مدت 10 دقیقه نصف مول‌های A ترکیب شونده مصرف شود، بعد از چند دقیقه تحت شرایط یکسان 90 درصد از مول‌های A مصرف خواهد شد؟

- (۱) 25 (۲) 50 (۳) 90 (۴) 25

۶. واکنش درجه اول برگشت‌ناپذیر، حالت خاصی از یک واکنش درجه اول برگشت‌پذیر می‌باشد، در این حالت ضریب تعادلی K_C کدام است؟

- (۱) $k_C = 0$ (۲) $k_C = k_1$ (۳) $k_C = k_2$ (۴) $k_C = \infty$

۷. اگر سرعت واکنشی به صورت $-r_A = \frac{0.5C_A}{1+C_A}$ باشد، کدام گزینه در مورد آن، صادق است؟

- (۱) درجه واکنش در محدوده‌ای از غلظت، صفر است.
(۲) ثابت سرعت در محدوده‌ای از غلظت، برابر با 0.5 است.
(۳) ثابت سرعت در محدوده‌ای پایین غلظت A، برابر با 0.5 است.
(۴) همه موارد صحیح است.

۸. یک واکنش اتوکاتالیزوری $A + R \rightarrow R + R$ با معادله سرعت $-r_A = kC_A C_R$ در یک راکتور ناپیوسته انجام

می‌شود. اگر $C_{A0} = 2 \frac{\text{mol}}{\text{lit}}$ و $C_{R0} = 0.5 \frac{\text{mol}}{\text{lit}}$ باشد، حداکثر سرعت $\left(\frac{\text{مول}}{\text{لیتر.دقیقه}} \right)$ ، در چه غلظتی از A حاصل می‌شود؟

- (۱) 0.5 (۲) 1.25 (۳) 1.5 (۴) 2.1

۹. جسم A در فاز مایع با معادله سرعت درجه دو در یک راکتور ناپیوسته تجزیه می‌شود. اگر بعد از گذشت 10 دقیقه، نصف A از بین برود، زمان لازم برای تجزیه شدن کامل A، برابر کدام است؟

- (۱) دو برابر زمان لازم برای نصف شدن مقدار A (۲) چهار برابر زمان لازم برای نصف شدن مقدار A
(۳) هشت برابر زمان لازم برای نصف شدن مقدار A (۴) در زمان محدود واکنش کامل نمی‌شود.

۱۰. واکنشی در فاز مایع با تبدیل 80 درصد نخست در یک راکتور لوله‌ای پیوسته (مورد اول) و سپس در یک راکتور مخلوط شونده پیوسته (مورد دوم) انجام می‌شود. نسبت حجم مورد اول به مورد دوم، برابر کدام است؟

- (۱) 0.1 (۲) 0.2 (۳) 0.3 (۴) 0.4

۱۱. در یک واکنش فاز گاز $2A \rightarrow R$ در یک راکتور ناپیوسته در فشار ثابت با حجم اولیه 2 لیتر صورت می‌گیرد. پس از 5 دقیقه، غلظت A از 10 به 4 مولار تغییر می‌کند. حجم راکتور در این لحظه چند لیتر است؟

- (۱) 1.25 (۲) 1.33 (۳) 1.67 (۴) 2.0

۱۲. واکنش $A \rightarrow R$ در یک راکتور ناپیوسته با $C_{A0} = 1 \frac{\text{mol}}{\text{lit}}$ و سرعت $-r_A = 4C_A^{0.5}$ انجام می‌گیرد. میزان

تبدیل A بعد از یک ساعت از شروع واکنش، کدام است؟

- (۱) 0.75 (۲) 0.80 (۳) 0.90 (۴) 1.00

۱۳. در واکنش سری درجه اول $A \xrightarrow{k_1} R \xrightarrow{k_2} S$ ، $k_2 = 1$ و $k_1 = 0.07$ باشد. مقدار C_s را پس از 1

دقیقه طوری بیابید که $C_{Ao} = 1 \frac{\text{mol}}{\text{lit}}$ باشد؟

- (۱) $1 - e^{-1}$ (۲) $2 - e^{-1}$ (۳) $1 - e$ (۴) $2 - e$

۱۴. در واکنش‌های درجه اول $A \begin{cases} \xrightarrow{k_1} R \\ \xrightarrow{k_2} S \end{cases}$ ، اگر $k_1 = 3k_2 = 1$ باشد، مقدار $t_{\frac{1}{2}}$ در حالی که $C_{Ao} = 2 \frac{\text{mol}}{\text{lit}}$ باشد،

کدام است؟

- (۱) 0.4 (۲) 0.517 (۳) 0.69 (۴) 0.8

۱۵. در یک راکتور مخلوط شونده پیوسته، یک واکنش درجه اول صورت می‌گیرد و درصد تبدیلی برابر 20 دارد. اگر

دبی حجمی ورودی به راکتور نصف شود، درصد تبدیل کدام خواهد بود؟

- (۱) 33 (۲) 40 (۳) 50 (۴) 67

پاسخ تشریحی

۱. گزینه ۳ درست است.

$$C_R - C_{R_0} = \phi \left(\frac{R}{A} \right) (C_{A_0} - C_A)$$

$$C_R = (0.1 + 0.01C_A)(10 - C_A) \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_R}{\partial C_A} = 0 \rightarrow 0.01(10 - C_A) - (0.1 + 0.01C_A) = 0 \rightarrow C_A = 0$$

حال در رابطه (1) جایگذاری می‌کنیم:

$$C_{R_{\max}} = (0.1 + 0)(10 - 0) = 1 \frac{\text{mol}}{\text{lit}}$$

۲. گزینه ۲ درست است.

نکته: چون مواد A و B به نسبت استوکیومتری وارد شده‌اند پس در تمام طول واکنش به نسبت استوکیومتری می‌باشند.
($C_A = C_B$)

$$-r_A = k_1 C_A C_B - k_2 C_R \xrightarrow[C_{R_0}=0]{C_A=C_B} -r_A = k_1 C_A^2 - k_2 (C_{A_0} - C_A)$$

$$\text{در حالت تعادل: } 0 = k_1 (0.5)^2 - k_2 (1 - 0.5) \rightarrow k_2 = 0.5k_1$$

$$C_A = 0.6, \quad (-r_A) = 0.16 : 0.16 = k_1 (0.6)^2 - k_2 (1 - 0.6)$$

$$\Rightarrow 0.16 = 0.36k_1 - 0.4k_2$$

از حل دو معادله و دو مجهول فوق خواهیم داشت:

$$k_1 = 1 \frac{\text{lit}}{\text{mol} \cdot \text{min}}, \quad k_2 = 0.5 \text{ min}^{-1}$$

۳. گزینه ۳ درست است.

$$\phi \left(\frac{R}{A} \right) = \frac{k_1 C_A}{k_1 C_A + k_2 C_A + k_3 C_A} = \frac{k_1}{k_1 + k_2 + k_3}$$

به همین ترتیب

$$\varphi\left(\frac{S}{A}\right) = \frac{k_2}{k_1 + k_2 + k_3}$$

$$\varphi\left(\frac{T}{A}\right) = \frac{k_3}{k_1 + k_2 + k_3} \quad \text{خواهد بود. در یک راکتور مخلوط شوند:}$$

$$C_R - C_{R_0} = \varphi\left(\frac{R}{A}\right)(C_{A_0} - C_A)$$

$$C_R - C_{R_0} = \frac{k_1}{k_1 + k_2 + k_3}(C_{A_0} - C_A)$$

به همین ترتیب

$$C_S - C_{S_0} = \frac{k_2}{k_1 + k_2 + k_3}(C_{A_0} - C_A)$$

$$C_T - C_{T_0} = \frac{k_3}{k_1 + k_2 + k_3}(C_{A_0} - C_A)$$

واضح است که با افزایش C_{A_0} مقدار محصولات R, S و T زیاد می شود ولی درصد آن ها در محصول نهایی ثابت باقی می ماند.

۴. گزینه ۴ درست است.

$$P_A = P_{A_0} - \frac{a}{\Delta n}(\pi - \pi_0)$$

چون خوراک A خالص است پس:

$$P_{A_0} = \pi_0 = 3 \text{ atm}$$

$$P_A = 3 - \frac{1}{5-1}(\pi - 3) \quad (1)$$

مسئله π را خواسته است. ابتدا باید P_A را محاسبه کنیم:

$$-\frac{dP_A}{dt} = k \rightarrow P_A = P_{A_0} - kt$$

$$P_A = 3 - 10(0.1) = 2 \text{ atm}$$

با جایگذاری در رابطه (1):

$$2 = 3 - \frac{1}{4}(\pi - 3) \Rightarrow \pi = 7 \text{ atm}$$

۵. گزینه ۳ درست است.

برای واکنش درجه دوم فاز مایع در راکتور ناپیوسته داریم:

$$\frac{x_A}{1-x_A} = ktC_{A_0}$$

حالت اول و دوم رابطه فوق را نوشته و بر هم تقسیم می کنیم:

$$\frac{\left(\frac{x_{A_2}}{1-x_{A_2}}\right)}{\left(\frac{x_{A_1}}{1-x_{A_1}}\right)} = \frac{t_2}{t_1} \rightarrow \frac{\left(\frac{0.9}{1-0.9}\right)}{\left(\frac{0.5}{1-0.5}\right)} = \frac{t_2}{10}$$

$$\frac{9}{1} = \frac{t_2}{10} \rightarrow t_2 = 90 \text{ min}$$

۶. گزینه ۴ درست است.

در یک واکنش درجه اول برگشت‌ناپذیر ثابت تعادلی k_c برابر بی‌نهایت می‌باشد.

۷. گزینه ۴ درست است.

درجه واکنش صفر است. $\Rightarrow -r_A = \frac{0.5C_A}{C_A} = 0.5 \rightarrow C_A \gg 1$: اول واکنش

درجه واکنش برابر یک است. $-r_A = 0.5C_A$: آخر واکنش

با توجه به موارد فوق، گزینه ۴ درست است.

۸. گزینه ۲ درست است.

در یک واکنش اتوکاتالیزوری، سرعت واکنش زمانی حداکثر است که:

$$C_A = C_R = \frac{C_{A_0} + C_{R_0}}{2} = \frac{2 + 0.5}{2} = 1.25 \frac{\text{mol}}{\text{lit}}$$

۹. گزینه ۴ درست است.

واکنش‌های با درجه بزرگ‌تر یا مساوی یک هیچ‌گاه به پایان نمی‌رسند، به عبارت دیگر برای واکنش‌های درجه n ($n \geq 1$) زمان اختتام نداریم.

۱۰. گزینه ۴ درست است.

برای واکنش درجه اول فاز مایع داریم:

$$\text{راکتور لوله‌ای: } -\ln(1 - x_A) = k\tau_p$$

$$\text{راکتور مخلوط‌شونده: } \frac{x_A}{1 - x_A} = k\tau_m$$

از تقسیم دو رابطه بر هم داریم:

$$\frac{\tau_p}{\tau_m} = \frac{V_p}{V_m} = \frac{-\ln(1 - x_A)}{\left(\frac{x_A}{1 - x_A}\right)}$$

$$\frac{V_p}{V_m} = \frac{-\ln(0.2)}{\left(\frac{0.8}{0.2}\right)} = \frac{1.6}{4} = 0.4$$

۱۱. گزینه ۱ درست است.

$$2A \rightarrow R \quad \varepsilon_A = \frac{\Delta n}{a} \times y_{A_0} = -0.5$$

$$C_A = C_{A_0} \left(\frac{1 - x_A}{1 + \varepsilon_A x_A} \right) \rightarrow x_A = \frac{1 - \frac{C_A}{C_{A_0}}}{1 + \varepsilon_A \frac{C_A}{C_{A_0}}}$$

$$x_A = \frac{1 - \frac{4}{10}}{1 + (-0.5)\left(\frac{4}{10}\right)} = \frac{0.6}{0.8} = \frac{3}{4}$$

$$V = V_0(1 + \varepsilon_A x_A) = 2\left(1 - \frac{1}{2} \times \frac{3}{4}\right) = 1.25 \text{ lit}$$

۱۲. گزینه ۴ درست است.

$$-r_A = kC_A^n \rightarrow \frac{C_{A0}^{1-n} - C_A^{1-n}}{1-n} = kt$$

$$n = 0.5 \rightarrow \frac{1 - C_A^{0.5}}{0.5} = 4 \times 1$$

$$1 - \sqrt{C_A} = 2 \rightarrow \sqrt{C_A} = -1$$

و این نشان می‌دهد که واکنش تمام شده است و درجه تبدیل $x_A = 1$ یا 100% است.

$$t_{\text{end}} = \frac{C_{A0}^{1-n}}{(1-n)k} = \frac{1}{0.5 \times 4} = 0.5 \text{ hr}$$

زمان اختتام واکنش نیم ساعت بوده و واضح است که واکنش پس از 4 ساعت تمام می‌شود.

۱۳. هیچ کدام از گزینه‌ها درست نیست.

$$k_2 \gg k_1 \Rightarrow C_S = C_{A0}(1 - e^{-k_1 t})$$

$$k_1 \ll k_2 \Rightarrow C_S = C_{A0}(1 - e^{-k_2 t})$$

در این مسئله $k_1 \ll k_2$ و در نتیجه:

$$C_S = (1 - e^{-0.07})$$

که در گزینه‌ها نیست به نظر می‌رسد منظور طراح محترم گزینه (۱) می‌باشد که معادل با حالت $k_2 \ll k_1$ است.

۱۴. گزینه ۲ درست است.

$$-r_A = k_1 C_A + k_2 C_A = (k_1 + k_2) C_A = k' C_A$$

برای واکنش درجه اول، زمان نیمه عمر از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$t_{\frac{1}{2}} = \frac{\ln 2}{k'} = \frac{\ln 2}{k_1 + k_2}$$

$$t_{\frac{1}{2}} = \frac{\ln 2}{1 + \frac{1}{3}} = \frac{\ln 2}{\left(\frac{4}{3}\right)} = \frac{2.1}{4} = 0.517$$

۱۵. گزینه ۱ درست است.

برای واکنش درجه اول در یک راکتور مخلوط شونده داریم:

$$\frac{x_A}{1 - x_A} = k\tau \quad \text{یا} \quad x_A = \frac{k\tau}{1 + k\tau}$$

در حالت اول که درصد تبدیل $x_A = 0.2$ است، داریم:

$$k\tau = \frac{0.2}{1-0.2} = \frac{1}{4}$$

در حالت دوم که دبی حجمی ورودی به راکتور نصف می‌شود، زمان پر شدن دو برابر می‌شود:

$$\tau = \frac{V}{v_0} \rightarrow \tau' = 2\tau \rightarrow k\tau' = 2k\tau \Rightarrow k\tau' = \frac{1}{2}$$

$$x'_A = \frac{k\tau'}{1+k\tau'} = \frac{0.5}{1+0.5} = \frac{1}{3} \text{ یا } 33.3\%$$