

**Izoterm szakaszos reaktor, illetve izoterm csőreaktor számítása ( $V = \text{állandó}$ )**

$$t = c_{j0} \int_0^X \frac{dX}{-v_j r}$$

Az  $j$ -edik komponens mindig a limitáló komponens. Ez a táblázatban a példa kedvéért mindig az A komponens. Szakaszos reaktor esetén  $t$  a reakcióidőt jelenti, csőreaktornál az átlagos tartózkodási időt.

Reakció típusa és rendje	A reakciósebesség egyenlete	$t = c_{A0} \int_0^X \frac{dX}{-v_A r}$ behelyettesítve	A $t$ az integrálás elvégzése után	X (az előző oszlop átrendezésével)
A → B nulladrendű	$r = k$	$t = \frac{c_{A0}}{k} \int_0^X dX$	$\frac{c_{A0} \cdot X}{k}$	$\frac{k \cdot t}{c_{A0}}$
A → B elsőrendű	$r = k \cdot c_A = k \cdot c_{A0} \cdot (1 - X)$	$t = \frac{1}{k} \int_0^X \frac{dX}{(1 - X)}$	$-\frac{1}{k} \ln(1 - X)$	$1 - e^{-k \cdot t}$
A → B m-ed rendű ( $m \neq 1$ )	$r = k \cdot c_A^m = k \cdot c_{A0}^m \cdot (1 - X)^m$	$t = \frac{c_{A0}^{1-m}}{k} \int_0^X \frac{dX}{(1 - X)^m}$	$\frac{(1 - X)^{1-m} - 1}{k \cdot c_{A0}^{m-1} \cdot (m - 1)}$	$1 - \left(1 + (m - 1) \cdot k \cdot t \cdot c_{A0}^{m-1}\right)^{\frac{1}{1-m}}$
A + B → P másodrendű ( $c_{A0} = c_{B0}$ )	$r = k \cdot c_A^2 = k \cdot c_{A0}^2 \cdot (1 - X)^2$	$t = \frac{1}{k \cdot c_{A0}} \int_0^X \frac{dX}{(1 - X)^2}$	$\frac{(1 - X)^{-1} - 1}{k \cdot c_{A0}} = \frac{1}{k \cdot c_{A0}} \cdot \frac{X}{1 - X}$	$\frac{k \cdot t \cdot c_{A0}}{1 + k \cdot t \cdot c_{A0}}$
A + B → P másodrendű ( $c_{A0} < c_{B0}$ )	$r = k \cdot c_A \cdot c_B =$ $= k \cdot c_{A0} \cdot (1 - X) \cdot (c_{B0} - c_{A0} \cdot X)$	$t = \frac{1}{k} \int_0^X \frac{dX}{(1 - X) \cdot (c_{B0} - c_{A0} \cdot X)}$	$= \frac{1}{k \cdot (c_{B0} - c_{A0})} \cdot \ln \frac{c_{B0} - c_{A0} X}{c_{B0} (1 - X)}$	$\frac{c_{B0} \cdot (e^{k \cdot t \cdot (c_{B0} - c_{A0})} - 1)}{c_{B0} \cdot e^{k \cdot t \cdot (c_{B0} - c_{A0})} - c_{A0}}$
$A \xrightleftharpoons[k_{-1}]{k_1} B$ $c_{B0} = 0$	$r = k_1 c_A - k_{-1} c_B =$ $= k_1 c_{A0} (1 - X) - k_{-1} c_{A0} \cdot X =$ $= c_{A0} \cdot k_1 \left(1 - \frac{k_1 + k_{-1}}{k_1} X\right)$	$t = \frac{1}{k_1} \int_0^X \frac{dX}{\left(1 - \frac{k_1 + k_{-1}}{k_1} X\right)}$	$-\frac{1}{k_1 + k_{-1}} \ln\left(1 - \frac{k_1 + k_{-1}}{k_1} X\right)$	$\frac{k_1}{k_1 + k_{-1}} \left(1 - e^{-(k_1 + k_{-1}) \cdot t}\right)$

### Izoterm, tökéletesen kevert tartályreaktor számítása

$$V = \dot{V} \cdot \bar{t}$$

$\frac{1}{\bar{t}} \cdot (c_{j0} - c_j) + v_j \cdot r = 0$  stacioner állapotban, térfogatváltozás nélküli reakciónál. Behelyettesítve a konverziót:

$$\frac{1}{\bar{t}} \cdot \frac{(c_{j0} - c_j)}{c_{j0}} + \frac{v_j \cdot r}{c_{j0}} = 0 \Rightarrow \frac{1}{\bar{t}} \cdot X = - \frac{v_j \cdot r}{c_{j0}}$$

Az  $j$ -edik komponens mindig a limitáló komponens. Ez a táblázatban a példa kedvéért mindig az A komponens.

Reakció típusa és rendje	A reakciósebesség egyenlete és behelyettesítés	$\bar{t}$ (reakciósebesség behelyettesítve majd átrendezve)	X (az előző oszlop átrendezésével)
A → B nulladrendű	$r = k$ $\frac{1}{\bar{t}} \cdot X = - \frac{-1 \cdot k}{c_{A0}}$	$\frac{c_{A0} \cdot X}{k}$	$\frac{k \cdot \bar{t}}{c_{A0}}$
A → B elsőrendű	$r = k \cdot c_A = k \cdot c_{A0} \cdot (1 - X)$ $\frac{1}{\bar{t}} \cdot X = k \cdot (1 - X)$	$\frac{1}{k} \cdot \frac{X}{1 - X}$	$\frac{k \cdot \bar{t}}{1 + k \cdot \bar{t}}$
A → B m-ed rendű (m ≠ 1)	$r = k \cdot c_A^m = k \cdot c_{A0}^m \cdot (1 - X)^m$ $\frac{1}{\bar{t}} \cdot X = k \cdot c_{A0}^m \cdot (1 - X)^m$	$\frac{1}{k \cdot c_{A0}^{m-1}} \cdot \frac{X}{(1 - X)^m}$	$\frac{k \cdot \bar{t} \cdot c_{A0}^{m-1}}{1 + k \cdot \bar{t} \cdot c_{A0}^{m-1}}$
A + B → P másodrendű ( $c_{A0} = c_{B0}$ )	$r = k \cdot c_A^2 = k \cdot c_{A0}^2 \cdot (1 - X)^2$ $\frac{1}{\bar{t}} \cdot X = k \cdot c_{A0}^2 \cdot (1 - X)^2$	$\frac{1}{k \cdot c_{A0}} \cdot \frac{X}{(1 - X)^2}$	$\frac{2k \cdot \bar{t} \cdot c_{A0} + 1 - \sqrt{1 + 4k \cdot \bar{t} \cdot c_{A0}}}{2k \cdot \bar{t} \cdot c_{A0}}$
A + B → P másodrendű ( $c_{A0} < c_{B0}$ )	$r = k \cdot c_A \cdot c_B =$ $= k \cdot c_{A0} \cdot (1 - X) \cdot (c_{B0} - c_{A0} \cdot X)$ $\frac{1}{\bar{t}} \cdot X = k \cdot c_{A0} \cdot (1 - X) \cdot (c_{B0} - c_{A0} \cdot X)$	$\frac{1}{k} \cdot \frac{X}{(1 - X) \cdot (c_{B0} - c_{A0} \cdot X)}$	$\frac{1 + (c_{B0} + c_{A0}) \cdot k \cdot \bar{t} - \sqrt{(1 + (c_{B0} - c_{A0}) \cdot k \cdot \bar{t})^2 + 4k \cdot \bar{t} \cdot c_{A0}}}{2k \cdot \bar{t} \cdot c_{A0}}$