

Arkiv

Arkivnr.

RAPPORT

fra Gruppe nr ____:

til **INSTITUTT FOR KJEMISK
PROSESSTEKNOLOGI**

OPPGAVE:

Reaksjonen mellom tert-butyl klorid og metanol skal undersøkes ved ulike reaksjonsbetingelser.

Forsøkene utføres i en CSTR reaktor. Omsetningen følges ved pH-meter. Reaktantene består av tert-butyklorid i metanol og vann i metanol.

Temperatur og oppholdstid varieres, mens startkonsentrasjon av tert-butyl klorid og molbrøken vann holdes konstant.

For samtlige reaksjonsbetingelser skal hastighetskonstanten for reaksjonen fra venstre mot høyre bestemmes, med antagelse om irreversibel reaksjon. Aktiviseringsenergien skal også bestemmes (kun for versjon 3).

Litteratur:

Cropper, W.H., Spieth, F. og Olsen, A.R.,

J. Am. Chem. Soc., 76, 6248-6253 (1954).

Utlevert:

Frist:

Innlevert:

Anm.

Poeng:

Karakter:

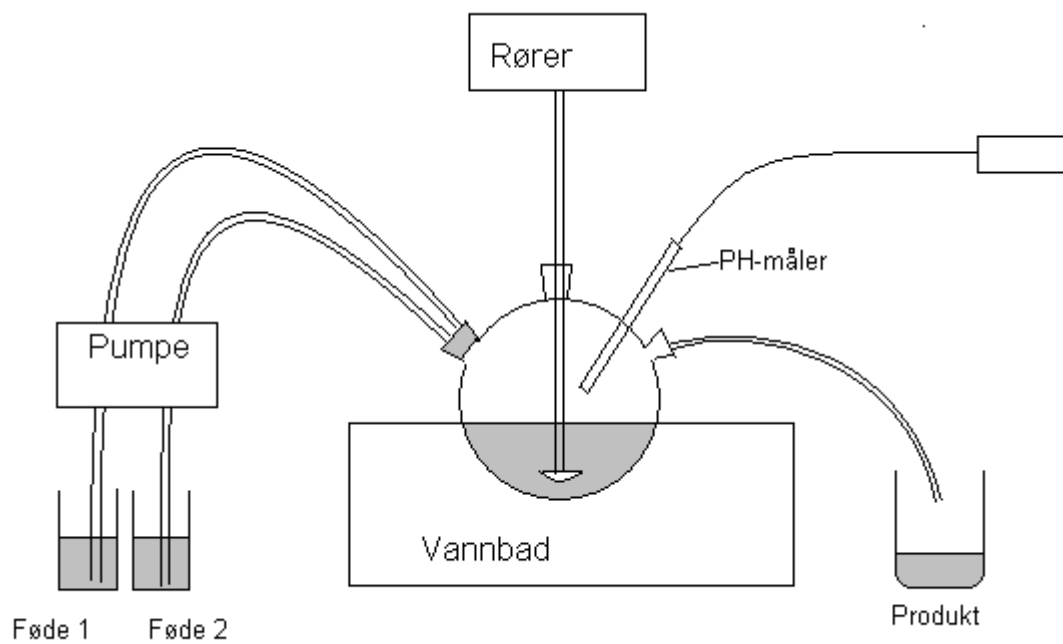
Sett:

Kinetic study in CSTR

Forsøksbetingelser

Forsøk nummer	Temperatur [°C]	Fødehastighet [ml/h]	Konsentrasjon tBC [mol/dm ³]	Gruppe nummer
1	30	600	0.025	-
2	30	500	0.025	-
3	30	400	0.025	-
4	40	600	0.025	-
5	40	500	0.025	-
6	40	400	0.025	-
7	45	600	0.025	-
8	45	500	0.025	-
9	45	400	0.025	-
10	50	600	0.025	-
11	50	500	0.025	-
12	50	400	0.025	-
13	30	600	0.035	-
14	30	500	0.035	-
15	30	400	0.035	-
16	40	600	0.035	-
17	40	500	0.035	-
18	40	400	0.035	-
19	45	600	0.035	-
20	45	500	0.035	-
21	45	400	0.035	-
22	50	600	0.035	-
23	50	500	0.035	-
24	50	400	0.035	-

Apparatusskisse



Figur 1: Forsøksoppsett for kinetikkstudie i en CSTR reaktor.

Fremgangsmåte

Oppstart:

Bruksanvisning for vannbad og pH-elektroden skal finnes på labben.

1. Pumpene kalibreres (gjøres på forhånd av vit.ass).
2. Reaktantløsningene lages (totalt 1 liter løsning, fordelt i 2*500ml målekolber).
Fordelaktig å veie ut løsningene.
3. Fødeslangene settes i reaktantløsningene.
4. Pumpene stilles på ønsket nivå.
5. Om ønskelig kan reaktoren fylles med reaktantløsning før forsøket settes igang for å spare tid.
6. Koble sammen reaktoren: Røring, inn/ut-løsning, pH-elektrode (pH elektroden skylles med destillert vann før den settes i reaktoren).
7. Reaktorrøring settes på.
8. Vannbadet stilles på ønskelig temperatur (start med laveste temperatur).
9. Samle produktstrømmen ut av reaktoren i et ”begerglass”. Se etter at dere har en jevn strøm/jevn nivå i reaktor!
10. Avles pH når den har stabilisert seg (kan ta lang tid! Særlig ved lav førehastighet).

Nytt forsøk:

1. IKKE TØM UT BRUKT LØSNING FØR NYTT FORSØK
2. Pumpene stilles på nytt ønsket nivå.
3. Temperaturen i vannbadet settes til nytt nivå.
4. Avles pH når den har stabilisert seg.

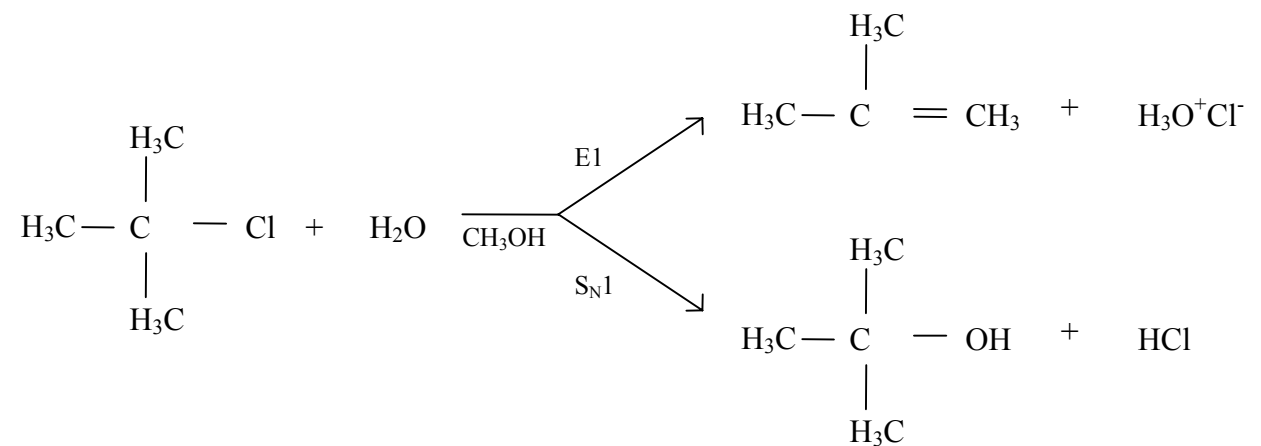
Avslutning:

1. Vannbadet skrues av.
2. Røringen skrues av.
3. Pumpene stoppes.
4. pH-elektroden fjernes, skylles med destillert vann, og settes tilbake i oppbevaringsløsningen.

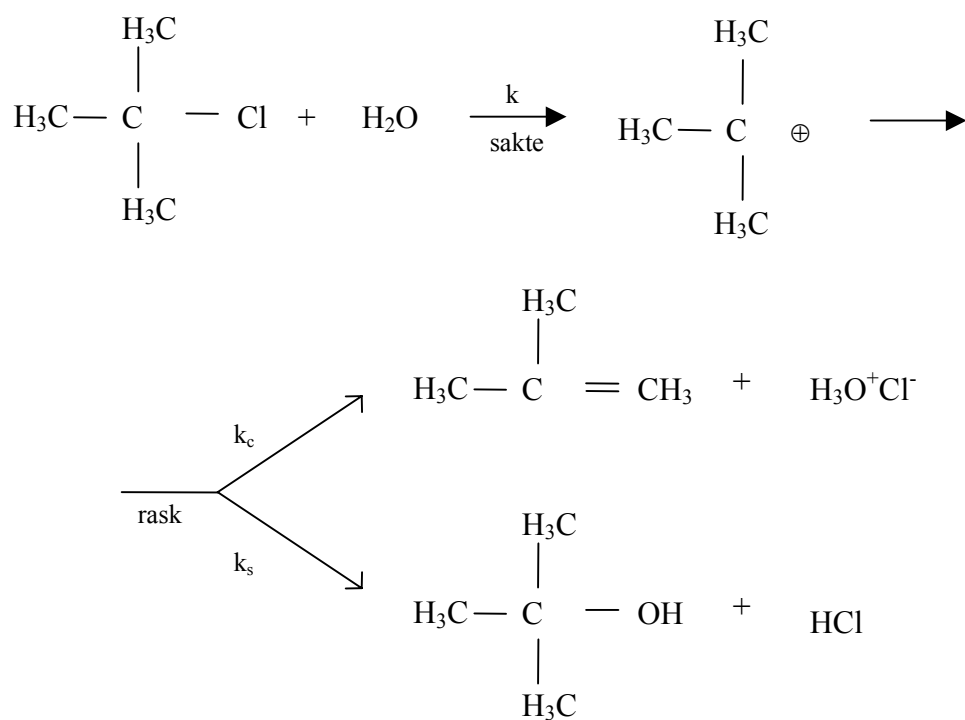
NB: Påse at alt elektrisk utstyr er avslått!!!

Teori

Hydrolyse av ter. butylklorid (bruttorx.):



Mekanisme for hydrolysen:



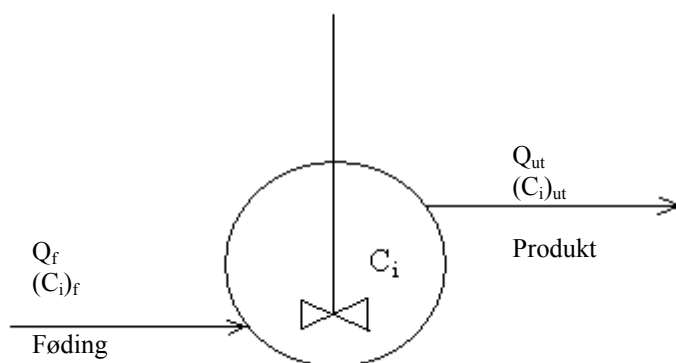
Splittelsen av tert. Butylklorid til karbokation og kloridion er det hastighetsbestemende trinn.

Splittelsen er unimolykulær, dvs. Hastighetsuttrykket blir på formen :

$$r = k [\text{tert.butylklorid}]$$

Dvs. 1. Orden.

CSTR



Figur 2 Kontinuerlig blandetanksreaktor

Massebalanse:

$$Q_f (C_i)_f - Q_{ut} (C_i)_{ut} = -r_i V$$

$Q_f = Q_{ut}$ gir:

$$(C_i)_f - (C_i)_{ut} = -r_i V/Q = -r_i \bar{\theta}$$

hvor

$$\bar{\theta} = \frac{V}{Q} = \text{midlere oppholdstid}$$

1. ordens reaksjon ($r = k (C_i)_{ut} \bar{\theta}$);

$$(C_i)_f - (C_i)_{ut} = -k (C_i)_{ut} \bar{\theta}$$

hastighetskonstanten:
$$k = \left(\frac{(C_i)_f}{(C_i)_{ut}} - 1 \right) \cdot \frac{1}{\bar{\theta}}$$

Aktiveringsenergi:

Arrhenius ligning $k = A \cdot e^{\frac{-E_A}{RT}}$

$$\ln(k) = -\frac{E_A}{R} \cdot \frac{1}{T} + \ln(A)$$

Plott av $\ln(k)$ mot $1/T$ gir en rett linje med stigningstall lik $-\frac{E_A}{R}$, som gir aktiveringsenergien.

Utleddninger og mer utfyllende teori se Scott Fogler.

Forbredelse til møte

- Sett opp en plan for gjennomføring av forsøkene
- Sett dere inn i hvilke stoffer som benyttes, fyll ut kjemikalie kort, apparatur kort og signer ansvarserklæringen (HMS-hefte)
- Beregn volum av reaktant, vann og løsemiddel (metanol).
 - Total reaktantløsning skal være 1 liter.
 - Konsentrasjonen tBC på 1 liter løsning er gitt under forsøksbetingelsene (0.025 eller 0.035 M).
 - Løsningen skal inneholde metanol og vann i molforhold 1:1.
 - Beregn volum/mengde metanol, vann og tBC på 1 liter løsning.
 - Stoffene fordeles i 2x500ml målekolber, dette for å unngå reaksjon mellom vann og tBC.
 - Den ene kolben skal inneholde tBC løst i metanol (500 ml).
 - Den andre skal inneholde metanol og vann (500 ml).
- Tenk over nødvendige beregninger. Hvordan fordeles reaktantene i målekolbene? Hvordan beregnes utkonsentrasjonen av tBC?