

Differentialekvationer och reaktionskinetik

Klorering av bensen

Halogenering av kolväten är industriellt sätt vanliga och viktiga reaktioner. I denna uppgift skall en sådan typ av reaktion (klorering av bensen) simuleras.



Hastighetskonstanter för framåtreaktionerna är

$$k_{11} = 0.412 \text{ h}^{-1}, \quad k_{21} = 0.055 \text{ h}^{-1}$$

Reaktionerna ovan är inga elementarreaktioner men båda kan modelleras som första ordningens reaktioner, (R1) m.a.p C_6H_6 och (R2) m.a.p C_6H_5Cl (se¹ för en mer komplett reaktionsmekanism).

- a) Genom uttrycket för K i inledningen, uppskatta hastighetskonstanterna till bakåtreaktionerna (som däremot kan antas vara elementarreaktioner!) i (R1) och (R2) vid reaktionstemperaturen 400K.

Molära entropier (J/Kmol)

$$C_6H_6 = 269.31 \quad C_6H_5Cl = 310.1 \quad C_6H_4Cl_2 = 351.5 \quad Cl_2 = 223.081 \quad HCl = 186.902$$

- b) Modellera systemet genom att ställa upp hastighetsuttrycken för reaktionerna ovan. Simulera sedan systemet i **MATLAB** genom att lösa de ovan uppställda systemet av kopplade differentialekvationer samt åskådliggör lösningen grafiskt. Låt begynnelsevillkoret till systemet vara:

$$[C_6H_6]_0 = 0.5 \text{ M} \quad [Cl_2]_0 = 1 \text{ M}$$

- c) Lös optimeringsproblemet

$$\max_{t \geq 0} [C_6H_5Cl]$$

dvs bestäm den reaktionstid t_{opt} då det maximala utbytet av mellanprodukten C_6H_5Cl erhålls. Använd begynnelsevillkoret från b).

- i) Hur varierar t_{opt} och $\max[C_6H_5Cl]$ med varierande $[Cl_2]_0$? (OBS: $[Cl_2]_0 > [C_6H_6]_0$) Förklara resultatet.
- ii) Låt oss nu istället anta att C_6H_5Cl är en högst önskad mellanprodukt. För vilka reaktionstider gäller att $[C_6H_5Cl]/[C_6H_4Cl_2] < 0.1$? Vad blir den asymptotiska koncentrationen av $C_6H_4Cl_2$? (dvs då $t \rightarrow \infty$)

¹ Graham Solomons, Craig Fryhle, *Organic Chemistry*, kap 15.3