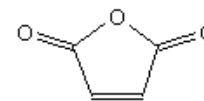
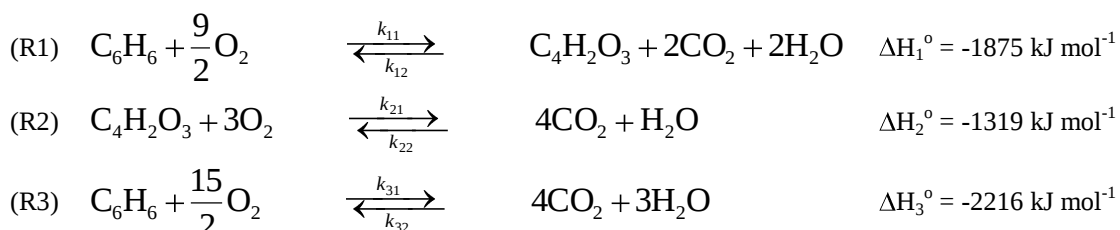


Differentialekvationer och reaktionskinetik



Oxidation av malonsyraanhydrid

Ett sätt att framställa malonsyraanhydrid ($C_4H_2O_3$) är genom oxidation av bensen (C_6H_6) över en vanadinpentoxidkatalysator. Under oxidationsförloppet sker också ett par parallella bireaktioner ((R2) och (R3)).



Hastighetskonstanter för framåtreaktionerna i reaktionstemperaturområdet är

$$k_{11} = 0.002 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}, \quad k_{21} = 0.0004 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}, \quad k_{31} = 0.0006 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

Observera att (R1)-(R3) inte är elementarreaktioner. Kinetiken kan dock formuleras som att (R1) är en andra ordningens reaktion m.a.p. bensen och syrgas. (R2) och (R3) är alla av första ordningen på C_6H_6 respektive $C_2H_4O_3$. I bakåtreaktionerna kan (R1) modelleras som en första ordningens reaktion m.a.p. malonsyraanhydriden. De andra två kan approximativt skrivas som andra ordningens reaktioner m.a.p koldioxid och vatten.

- a) Genom uttrycket för K i inledningen, uppskatta hastighetskonstanterna till bakåtreaktionerna i (R1) - (R3) vid reaktionstemperaturen 400K.

Molära entropier (J/Kmol)

$$C_6H_6 = 269.31 \quad C_4H_2O_3 = 300.75 \quad CO_2 = 213.785 \quad H_2O = 188.835 \quad O_2 = 205.152$$

- 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 begynnelsevärden till systemet vara:

$$[C_6H_6]_0 = 1 \text{ M} \quad [C_4H_2O_3]_0 = 0 \text{ M} \quad [CO_2]_0 = 0 \text{ M} \quad [H_2O]_0 = 0 \text{ M} \quad [O_2]_0 = 5 \text{ M}$$

Låt syretillförseln vara sådan att syrgaskoncentrationen hålls konstant under reaktionsförloppet.

- i) Då malonsyraanhydriden är den önskade produkten, lös optimeringsproblemet

$$\max_{t \geq 0} [C_4H_2O_3]$$

dvs finn den reaktionstid t_{opt} som maximerar $[C_4H_2O_3]$ för givna startvillkor.

- ii) Hur varierar t_{opt} med varierande $[C_6H_6]_0$? Hur varierar $\max [C_6H_6]$? Låt $[C_6H_6]_0 \in (0, 2) \text{ M}$.