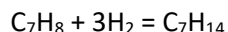


Задача:

В современной химии активно развивается научное направление, известное как зеленая химия. В зеленой химии активно применяются катализаторы, характеристики которых мы сегодня рассмотрим в данной задаче.

В проточный реактор загрузили палладиевый катализатор (в котором палладий нанесен на уголь и $\omega(\text{Pd}) = 1\%$) объемом 4 мл. Известно, что насыпная плотность катализатора равна 0.55 г/см^3 , его удельная поверхность равна $600 \text{ м}^2/\text{г}$.

В реакторе происходит следующая реакция гидрирования:



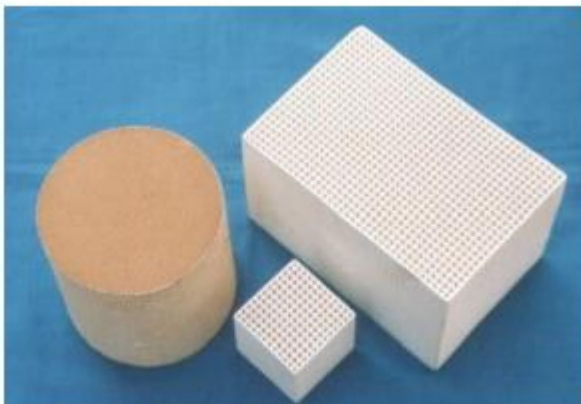
Толуол (C_7H_8) при гидрировании превращается в метилциклогексан (C_7H_{14}), при этом нам известно, что в начале реакции скорость подачи толуола в реактор – 3 моль/ч , а из реактора выходит 2.5 моль/ч толуола.

1. Определите удельную каталитическую активность на объем, массу и площадь поверхности катализатора, если известно, что активность измеряется как отношение скорости реакции к количеству катализатора (под количеством в данном случае может подразумеваться любая единица измерения для катализатора). Скорость измеряется в моль/ч .

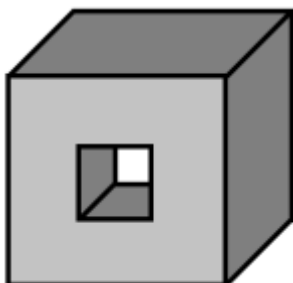
Для катализаторов вводят еще две характеристики: TOF и TON. TOF равно максимальному количеству превращающегося реагента, образовавшегося в единицу времени на одном активном центре катализатора. Активным центром мы считаем атом/группу атомов, при взаимодействии с которыми и происходит ускорение химических реакций. TON же равно количеству молей продукта, образовавшихся на одном моле активных центров до потери ими активности. TOF характеризует активность катализатора, а TON характеризует стабильность нашего катализатора, и для идеального катализатора эта величина равна бесконечности.

2. Определите TOF (в ч^{-1}) и TON для катализатора, указанного выше, если нам известны следующие условия: только 50% палладия образует активные центры (можно считать их одноатомными) и скорость реакции линейно падает со временем, становясь равной нулю через сутки после начала реакции.

Также свойства катализатора зависят от площади поверхности катализатора. Пример промышленного катализатора, использующего это свойство, представлен на фото. Представим, что процессы в катализаторе идут только на поверхности катализатора, тогда пусть у нас есть катализатор в виде кубика с длиной ребра 5 см и другой катализатор, представляющий собой такой же кубик, только с квадратной дыркой с длиной стороны квадрата 2 см.



3. Найдите отношение площадей поверхностей двух катализаторов и предскажите, на каком из них реакция будет идти быстрее. Рисунок катализатора с дыркой представлен ниже.



Решение:

1. Скорость реакции будет измеряться как разность потока толуола на входе и выходе, и она равна $r = 3 - 2.5 = 0.5$ моль/ч.

Тогда масса катализатора $m = \rho V = 0.55 \cdot 4 = 2.2$ г.

Площадь поверхности катализатора равна $S = S_{\text{уд}} \cdot m = 600 \cdot 2.2 = 1320$ м².

Тогда удельная каталитическая активность на массу равна $r/m = 0.5/2.2 = 0.227$ моль/г·ч; на объем – $r/V = 0.5/4 = 0.125$ моль/см³·ч; на площадь поверхности – $r/S = 0.5/1320 = 3.79 \cdot 10^{-4}$ моль/ч·м².

2. Поскольку в начале скорость реакции была наибольшей, то будем измерять TOF в начале реакции.

Тогда $\text{TOF} = n(\text{толуол}) / (t \cdot n(\text{Pd})) = r / n(\text{Pd})$ $n(\text{Pd}) = n_0(\text{Pd}) \eta = m w(\text{Pd}) \eta / M(\text{Pd}) = 2.2 \cdot 0.01 \cdot 0.5 / 106 = 1.04 \cdot 10^{-4}$ моль
 $\text{TOF} = 0.5 / 1.04 \cdot 10^{-4} = 4.81 \cdot 10^3$ ч⁻¹

Поскольку скорость реакции линейно падает, то можно представить ее падение в виде графика:

Заметим, что произведение скорости на время даст нам количество продукта, полученное за это время.

Тогда если скорость постоянна, то количество продукта равно площади голубого прямоугольника, но так как скорость падает, то количество продукта равно половине от данного прямоугольника. Тогда

$\text{TON} = r_{\text{max}} \cdot t / 2 n(\text{Pd}) = 0.5 \cdot 24 / 2 \cdot 1.04 \cdot 10^{-4} = 5.77 \cdot 10^4$.

3. Площадь поверхности куба $S = 6S_{\text{грani}} = 6a^2 = 6 \cdot 5^2 = 150 \text{ см}^2$

Площадь поверхности куба с дыркой равна площади поверхности куба, из которой вычли две квадратные дырки, и к ней еще добавляется площадь 4 прямоугольных поверхностей внутри дырки: $S_1 = S - 2b^2 + 4ab = 150 - 2 \cdot 2^2 + 4 \cdot 2 \cdot 5 = 182 \text{ см}^2$

$$S_1/S = 182/150 = 1.21$$

Реакция зависит от площади поверхности, так что на кубе с дыркой она будет идти точно быстрее.