chapter - 1 Introduction

CH- 5001 Chemical Reaction Engineering

Kamal Rathor

C.R.E. chemical engineering की एक शाखा है। जिसमें विभिन्न प्रकार की रासायनिक अभिक्रियाएँ, उनकी क्रियाविधि, और Reactor design में काम आने वाले मुख्य सिद्धान्तों के बारे में अध्ययन किया जाता है।

Chemical Reaction: ⇒

stoichiometric equation

$$aA + bB \longrightarrow rR + sS$$

Reactant A, B

Product R, S

a, b, r, s = stoichiometric coefficient

ex ⇒ $N_2 + 3H_2 \longrightarrow 2NH_3$

$28 \quad 6 \longrightarrow 34$

NH_3 100 tones/day

34 tones NH_3 28 Tone N_2

1 tone NH_3 = $\frac{28}{34}$ tone N_2

100 tone NH_3 = $\frac{28}{34} \times 100 = 82.35$ Tonne/day

34 tonnes NH_3 6 Tonne H_2

1 = $\frac{6}{34}$

100 = $\frac{6}{34} \times 100 = 17.64$ Tonnes H_2/Day

(ii) kinetics →

$$aA + bB \longrightarrow rR + sS$$

$-r_A \propto C_A^m$

$-r_A \propto C_B^n$

$-r_A \propto C_A^m C_B^n$

$-r_A = k C_A^m C_B^n$

k = Rate Constant

m+n = order of the ch. reaction.

ईकाई समय में conc में जितना change होता है उसे Rate of reaction कहते हैं।

Rate of Reaction ⇒ ईकाई समय पर किसी Reactant तथा product की Concentration में परिवर्तन Rate of reaction कहलाता है।

अथवा

अभिकारकों का उत्पाद में परिवर्तन होने मे जितना समय लगता है। वही उस अभिक्रिया का वेग कहलाता है।

अथवा

किसी भी Reactor में ईकाई समय व ईकाई आयतन में Reactant के जितने mole की संख्या product में Convert की जाती है। उसे Rate of chemical reaction या अभिक्रिया की दर कहा जाता है।

$$\boxed{A \longrightarrow R}$$

$$-r_A = -\frac{1}{V}\frac{dN_A}{dt} = kC_A^n$$

(यहाँ $(-r_A)$ मे -ve sign. यह दर्शाता है कि reactant A की मात्रा लगातार कम हो रही है।

$$-r_A = \frac{\text{moles of A Reacted}}{(\text{Volume})\ (\text{Time})}$$

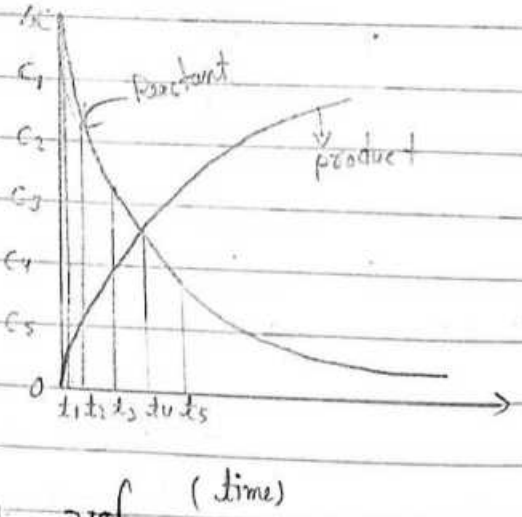
$-r_A$ = rate of RXN

N_A = Number of moles of Reactant A

time $t = 0$

V = Volume of Reactor

प्रारम्भ में Reactants की Conc सबसे ज्यादा होती है। जैसे - जैसे समय बढ़ता है। Reactants की conc मे कमी होती है। तथा वैसे - वैसे ही उत्पादों की सान्द्रता में वृद्धि होती है। यह प्रक्रिया लगातार चलती रहती है। परन्तु अभिकारकों की सान्द्रता कभी भी शून्य नही होती है। इसका अर्थ यह है कि अभिक्रिया अनन्त तक चलती है।



Unit of Rate of Reaction ⇒

$$\text{Rate of RXN} = +\frac{\Delta[C]}{\Delta t}$$

$$= \frac{\text{सान्द्रता}}{\text{समय}} = \frac{mol}{litre \times sec.} = mol \times litre^{-1} \times sec^{-1}$$

गैसीय RXN हो तो Rate of Reaction की Unit

atmosphere/sec.
pressure (atm)

1.2 Variables affecting rate of reaction ⇒ किसी भी रासायनिक अभिक्रिया को प्रभावित करने वाले विभिन्न कारकों को निम्न प्रकार से प्रदर्शित किया जाता है।

(i) Temperature
(ii) Pressure
(iii) Conc of reactants
(iv) Presence of Catalyst
(v) Nature of Reactants
(vi) Radiation effects.

(i) Temperature ⇒ किसी भी रासायनिक अभिक्रिया की दर को Temp. भी मुख्य रूप से प्रभावित करता है। जब किसी रासायनिक अभिक्रिया में Reactants के molecules लगातार गति करते रहते है। और आपस में टकराते रहते है। तथा Reactants की molecule की velocity का मान Temp. के वर्गमूल के समानुपाती होता है। $(v \propto \sqrt{T})$
जब किसी ch. reaction में reaction mixture का temp. बढ़ाया जाता है। तो reactant की velocity भी बढ़ जाती है और वे अधिक तेजी से गति करने लगते है। उनके आपस में टकराने के अवसर बढ़ जाता है। जिसके कारण rate of reaction का मान भी बढ़ जाता है।

(ii) Pressure ⇒ किसी भी chemical reaction की दर को pressure भी मुख्य रूप से प्रभावित करता है। जब किसी ~~chemical~~ reaction mixture का

$\uparrow P \propto \frac{1}{V\downarrow\uparrow}$ $\quad \downarrow T \propto \frac{1}{V\uparrow\downarrow}$ $\quad \boxed{PVC}$, $\quad P \propto$ rate of reaction

Pressure बढ़ाया जाता है। तो reactant के molecule अधिक निकट आ जाते है और उनके आपस में टकराने के अवसर भी बढ़ जाते है। जिसके कारण rate of reaction का मान भी बढ़ जाता है।

$$\uparrow R \propto r\uparrow$$

(iii) Conc. of reatants ⇒ किसी भी chemical reaction की दर को अभिकारकों की सान्द्रता भी मुख्य रूप से प्रभावित करता है। जब किसी chemical reaction में rate of reaction का मान अभिकारकों की सांद्रता के किसी ~~घात~~ घात के समानुपाती होता है। जब किसी chemical reaction में अभिकारकों की सांद्रता बढ़ायी जाती है तो rate of reaction का मान भी उसी अनुपात में बढ़ जाता है।

$$A + B \longrightarrow \text{products}$$

$$-r_A \propto C_A^m C_B^n$$

$$A \longrightarrow R$$

$$-r_A = k C_A^2 \qquad \Rightarrow 10 = k(1)^2$$

$$C_A = 1 \text{ kG mole/m}^3 \qquad k = 10$$

$$-r_A = 10 \frac{\text{kG moles}}{m^3 . \text{sec.}}$$

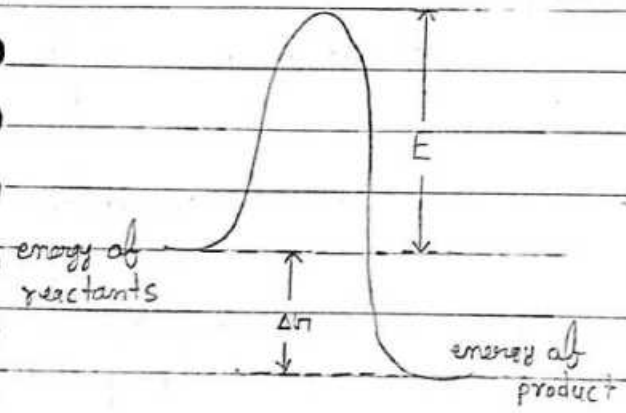
$$C_A = 5 \frac{\text{kG moles}}{m^3}$$

$$-r_A = 10 \times 25 = 250 \frac{\text{kG moles}}{m^3 \text{ sec.}}$$

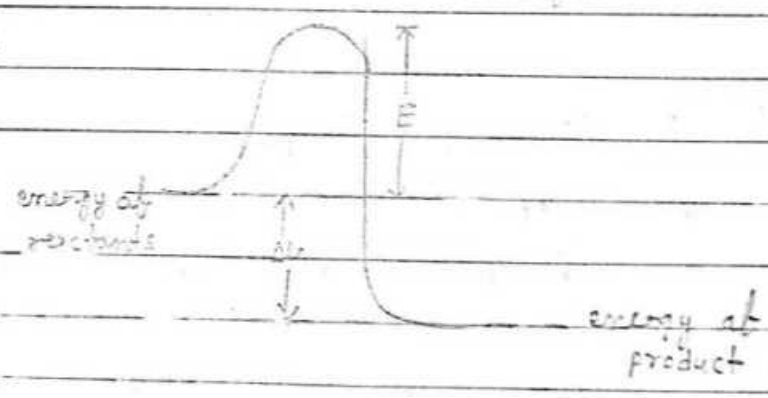
किसी भी रासायनिक अभिक्रिया में Reactants के molecule को product में Convert करने के लिए जो न्यूनतम energy की आवश्यकता होती है। उसे Activation energy कहा जाता है।

(iv) Presence of Catalyst ⇒ किसी भी chemical reaction की दर को Catalyst की उप० भी मुख्य रूप से प्रभावित करती है। उत्प्रेरक वह पदार्थ है। जो स्वयं chemical reaction ~~का मान कई~~ में भाग नहीं लेता है और rate of reaction का मान कई गुना बढ़ा देता है जब किसी ch. ~~रा~~ reaction में Catalyst का use किया जाता है तो रासायनिक अभिक्रिया के लिए Activation energy का मान कम हो जाता है। जिसके कारण उन अणुओं की संख्या जिनकी ऊर्जा activation energy के बराबर या उससे अधिक होती है। वह बढ़ जाती है। जिसके कारण reactant के molecule अधिक संख्या में reaction में भाग लेते है। और rate of reaction का मान बढ़ाते है।

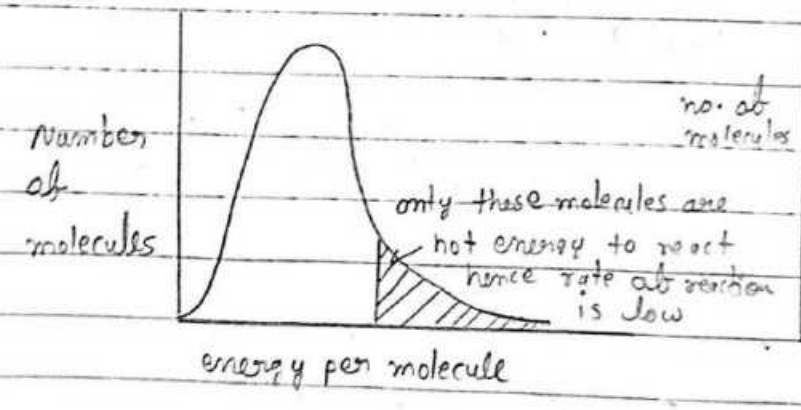
Reaction in absence of Catalyst



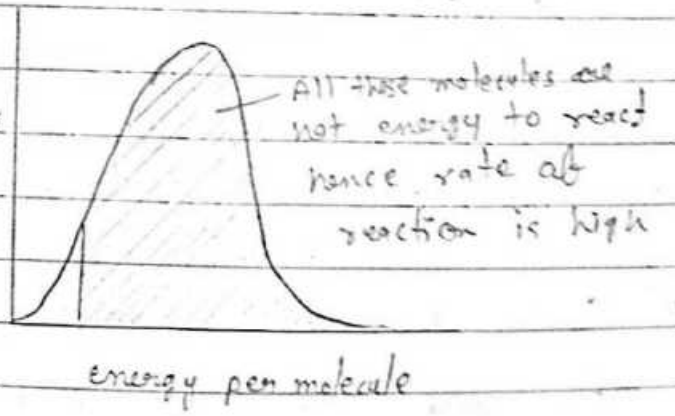
Reaction in presence of catalyst



E = activation energy.



presence of catalyst



(v) Nature of Reactants :→ किसी भी ch. reaction की दर को अभिकारकों की प्रकृति भी मुख्य रूप से प्रभावित करती है।

(Ionic)
अ० के लिए अकार्बनिक पदार्थ आयनिक प्रकृति के होने के कारण तेज गति से अभिक्रिया करते है। जबकि कार्बनिक पदार्थ आण्विक (molecular) प्रकृति के होने के कारण धीमी गति से अभिक्रिया करते है।

Inorganic Compounds — ionic in nature

$HCl + NaOH \longrightarrow NaCl + H_2O$

$H^+ Cl^- \; Na^+ OH^-$

(rate of reaction is high)

organic Compounds — molecular in nature

$n(CH_2 = CH_2) \longrightarrow (CH_2 - CH_2)_n$

ethylene — polyethylene

$CH = CH + H_2 \longrightarrow CH_2 = CH_2$

$CH_2 = CH_2 + H_2 \longrightarrow CH_3 - CH_3$

(rate of reaction is low)

(vi) Radiation effect ⇒ किसी भी Rate of chemical reaction को radiation effect भी मुख्य रूप से प्रभावित करते है।
अ० के लिए जब मेथेन व क्लोरिन की reaction अंधेरे कमरे में करायी जाती है। तो धीमी गति से होती है और यही अभिक्रिया सूर्य के प्रकाश में करायी जाती है तो तीव्र गति से होती है।

$CH_4 + 4Cl_2 \longrightarrow CCl_4 + 4HCl$
(कार्बन टेट्रा क्लोराइड)

ch. reaction in dark room — rate of reaⁿ is low
ch. reaction in presence of Sunlight — rate of reaction is high.

(vii) Surface Area of reactant ⇒ अभिकारक की सतह के क्षे० पर निर्भर करती है reactants का पृष्ठीय क्षे० जितना ज्यादा होगा उसके लिए Surface area भी उतना ही अधिक होगा।

ex⇒ Nacl का क्रिस्टल देरी से घुलता है। उसके Nacl के पाउडर की तुलना में

• किसी भी ch. reaction में reactant के Conc के घातों का योग order of reaction कहलाता है।

Molecularity of a chemical reaction ⇒ किसी भी chemical reaction में Reactant के जितने molecules अभिक्रिया में भाग लेते हैं। उसे उसकी molecularity कहा जाता है।

$$N_2 + 3H_2 \longrightarrow 2NH_3$$

molecularity = 1+3 = 4

$$2H_2 + O_2 \longrightarrow 2H_2O$$

molecularity = 2+1

order of chemical Reaction ⇒ किसी ch. reaction की Rate equation में Conc की जो घात लगायी जाती है। उसे उस अभिक्रिया का order कहा जाता है।

ex: ⇒ $-r_A = K[C_A]^x [C_B]^y$

order of reaction = $x+y$

Rate equation = $r_A = kC_A^m C_B^n$

$$aA + bB \longrightarrow rR + sS$$

order = $m+n$

molecularity = $a+b$

zero Order के लिए rate Constant की Unit

$$rate = K[CA]^0 \Rightarrow K_0 = rate = \frac{Conc}{t} = mol \times L^{-1} \times sec^{-1}$$

first Order के लिए

$$rate = K[CA]^1 = K_1 = \frac{rate}{[CA]} = \frac{\cancel{mol \times L^{-1}} \times sec^{-1}}{\cancel{Mol \times L^{-1}}} = sec^{-1}$$

defination of order of ch. reaction ⇒ किसी ch. reaction में reactant की Conc के घातों का योग order of reaction कहलाता है।

Second order के लिए :- $rate = k[CA]^2 = k_2 = \frac{rate}{[CA]^2}$

$$= \frac{(mol \times L^{-1}) \times s^{-1}}{(mol \times L^{-1})^2} = (mol \times L^{-1})^{1-2} s^{-1}$$

$$= (mol \times L^{-1})^{-1} s^{-1}$$

$$= mol^{-1} \times L \times s^{-1}$$

Third Order के लिए :-

$$rate = k[CA]^3 = k_3 = \frac{rate}{[CA]^3}$$

$$= \frac{(mol \times L^{-1}) \times s^{-1}}{(mol \times L^{-1})^3} = (mol \times L^{-1})^{1-3} \times s^{-1}$$

$$= (mol \times L^{-1})^{-2} \times s^{-1}$$

$$= mol^{-2} \times liter^2 \times sec^{-1}$$

order of reaction	Molecularity
① किसी रासायनिक अभिक्रिया के Conc. के घातो का योग reaction order कहलाता है।	① किसी भी ch. reaction में भाग लेने वाले अभिकारक की अणुओं की संख्या molecularity कहलाती है।
② यह एक experimental राशि है।	② reaction की molecularity theoritical quantity है।
③ इसका मान भिन्नात्मक प्राप्त हो सकता है	③ इसका मान हमेशा Integer (पूर्णांक) होता है।
④ इसका मान zero हो सकता है।	④ इसका मान zero नहीं हो सकता है।
⑤ यह अभिक्रिया की दर की mechanism show करती है।	⑤ यह अभिक्रिया की दर की mechanism show नहीं करती है।
⑥ इसका मान ~~4,5,6~~ 3 को अधिक हो सकता है।	⑥ इसका मान 1, 2, 3 हो सकता है

(*) अभिक्रिया की कोई संख्या से सम्बन्धित होती है।

(*) Example → zero

(1) $H_2 + Cl_2 \longrightarrow 2HCl$

(2) first

$H_2O_2 \longrightarrow H_2O + \frac{1}{2}O_2$

(3) Second

$2HI \longrightarrow H_2 + I_2$

(4) Third

$2NO + O_2 \longrightarrow 2NO_2$

(*) अभिक्रिया की molecularity अणुओं से सम्बन्धित होती है।

(*) Uni

$H_2O_2 \longrightarrow H_2O + O$

Bi $H_2 + I_2 \longrightarrow 2HI$

Tri

$3KClO_3 \longrightarrow 2KClO_3 + KClO_2$

यह केवल elementry reactions पर लागू होती है।

Rate Constant ⇒ किसी भी ch. reaction में rate of reaction का मान reactant की Conc के किसी घात के समानुपाती होता है। जब समानुपाती चिन्ह को हटाकर के equality sign लगाया जाता है तो एक Constant K लगाया जाता है। Rate Constant कहलाता है।

Rate of RxN = K × [function of Conc of reactant]

इसका मान मुख्य रूप से temp. पर निर्भर करता है। temp. पर निर्भरता का मान 3 theory द्वारा show किया जाता है जिसे Arrhenius theory, Collision theory, transition state theory.

अतः ऐसी अवस्था पर किसी reactant की ~~reaction~~ की rate of reaction उस reaction के Rate Constant के बराबर होती है।

Chapter=2 Types of Reaction

Kamal Rathar

① Classification of chemical Reaction ⇒ ch. process ind. में उपयोग में लायी जाने वाली chemical reaction को चार प्रकार से विभाजित किया जाता है।

(i) Single and multiple reaction
(ii) Reversible and irreversible reaction
(iii) elementry and Nonelementry reaction
(iv) homogeneous and heterogeneous reaction

2.1
(i) Single and multiple reaction ⇒

(a) single reaction ⇒ वे chemical reaction जिनकी progress को show करने के लिए एक ही stoichometry expression की आवश्यकता होती है। उसे Single reaction कहते है।

उदा० ⇒

$$C + O_2 \longrightarrow CO_2$$
$$S + O_2 \longrightarrow SO_2$$
$$2H_2 + O_2 \longrightarrow 2H_2O$$

वह अभिक्रिया जो एक ही पद में पूरी हो जाती है। उसे Single reaction कहते है।

(b) Multiple reaction ⇒ वे ch. reaction जिनकी progress को प्रदर्शित करने के लिए 2 या 2 से अधिक stoichometry expression की आवश्यकता होती है उसे multiple reaction कहते है।

उदा० ⇒

(ethyne) $CH \equiv CH + H_2 \longrightarrow CH_2 = CH_2$ (एथीन)

$CH_2 = CH_2 + H_2 \longrightarrow CH_3 - CH_3$ (एथेन)

$$CH_4 + Cl_2 \longrightarrow CH_3Cl + HCl$$
$$CH_3Cl + Cl_2 \longrightarrow CH_2Cl_2 + HCl$$
$$CH_2Cl_2 + Cl_2 \longrightarrow CHCl_3 + HCl$$
$$CHCl_3 + Cl_2 \longrightarrow CCl_4 + HCl$$

(कार्बन टेट्रा क्लोराइड)

वे ch. reaction जो एक से अधिक पदों में सम्पन्न होती है उसे multiple reaction कहते है।

जब कोई Reactant एक product में convert होता है और वह product दूसरे product में change होता है, तो इस प्रकार की reaction को multiple reaction in series कहते हैं।

multiple reaction को 2 भागों में बाँटा जाता है।

(1) Multiple reaction in Series ⇒ यदि किसी ch. reaction में कोई reactant A लगातार product A R S T U V में Convert होता जाता है उसे multiple reaction in series कहते हैं।

$$A \rightarrow R \rightarrow S \rightarrow T \rightarrow U \rightarrow V$$

उदा० ⇒

$$C \xrightarrow{+\frac{1}{2}O_2} CO \xrightarrow{+\frac{1}{2}O_2} CO_2$$

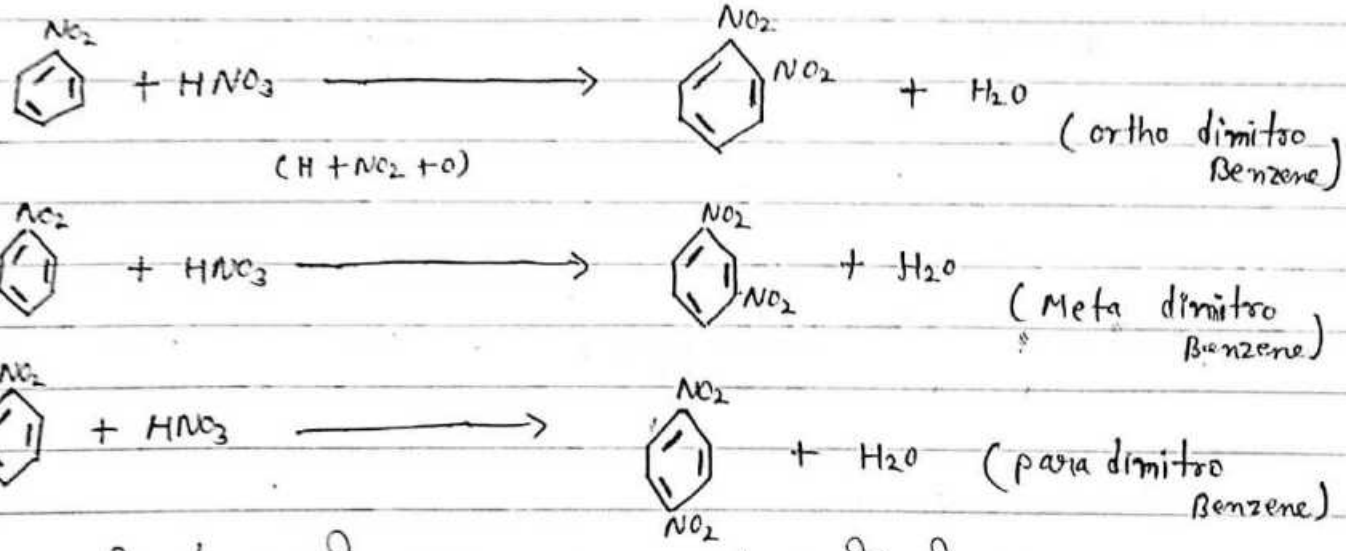
$$S \xrightarrow{+O_2} SO_2 \xrightarrow{+\frac{1}{2}O_2} SO_3$$

$$C_2H_2 \xrightarrow{+H_2} C_2H_4 \xrightarrow{+H_2} C_2H_6$$

(2) Multiple reaction in parallel ⇒ यदि किसी ch. reaction में कोई reactant A लगातार R, S, T, U में Convert होता जाता है। उसे multiple reaction in parallel कहते हैं।

$$A \rightarrow R, \quad A \rightarrow S, \quad A \rightarrow T, \quad A \rightarrow U$$

ex. ⇒



जब एक Reactant दो अलग - अलग product में दो अलग - अलग Reaction के द्वारा change होता है तो इस प्रकार की reaction multiple reaction in parallel कहलाती है।

Reversible reaction ⇒ वे ch. reaction जो दोनो दिशाओ में होती है। अर्थात् Reactant reaction करके product बनाते है व product पुन: reactants में परिवर्तित हो जाते है। उसे Reversible reaction कहते है

$$aA + bB \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} rR + sS$$

उदा० ⇒

$$N_2 + 3H_2 \xrightleftharpoons{Fe} 2NH_3$$

. पहली reaction को forward reaction कहा जाता है और दुसरी reaction को backward reaction कहा जाता है कुछ समय पश्चात forward reaction की rate व backward reaction की rate समान हो जाती है तो साम्यावस्था स्थापित हो जाती है। साम्यावस्था स्थापित होने के पश्चात् reactant व product की Conc में कोई परिवर्तन नही होता है।

C_A = Conc of Reactant A
C_B = Conc of Reactant B
C_R = Conc of Reactant R
C_S = Conc of Reactant S
k_1 = Rate constant for forward ch. reaction
k_2 = Rate Constant for backward ch. reaction
k_c = equilibrium Constant

$$K_c = \frac{k_1}{k_2}$$

Rate of forward ch. reaction
$= k_1 C_A^a C_B^b$

Rate of Backward ch. reaction $= k_2 C_R^r C_S^s$

At equilibrium Rate of forward ch. and Rate of backward ch

$$k_1 C_A^a C_B^b = k_2 C_R^r C_S^s$$

$$\frac{k_1}{k_2} = \frac{C_R^r C_S^s}{C_A^a C_B^b}$$

$$\frac{k_1}{k_2} = K_c$$

$$K_c = \frac{C_R^r C_S^s}{C_A^a C_B^b} \qquad K_c = \frac{[NH_3]^2}{[N_2][H_2]^3}$$

irreversible reaction ⇒ वह chemical reaction, जो केवल एक ही दिशा मे होती है उसे irreversible reaction कहते है।
इसमें reactant reaction करके product बनाते है लेकिन product पुन: Reactant में परिवर्तित नही होते है।

ex. ⇒

$$HCl + NaOH \longrightarrow NaCl + H_2O$$

$$CH_3COOH + C_2H_5OH \longrightarrow CH_3COOC_2H_5 + H_2O$$

(एसीटिक acid)

2.3

(i) Elementry reaction ⇒ वे रासायनिक अभिक्रिया जिसमें order व molecularity का समान होता है। उसे elementry reaction कहते है।

order = molecularity

$$aA + bB \longrightarrow rR + sS$$

Rate equation = $-r_A = k C_A^m C_B^n$ $\left(\begin{matrix} m=a \\ n=b \end{matrix}\right)$

$$2KClO_3 \longrightarrow 2KCl + 3O_2$$

$$-r_{KClO_3} = k[KClO_3]^2$$

$$-r_A = k C_A^n$$

(ii) Non-elementry reaction ⇒ वे रासायनिक अभिक्रिया जिसमें order और molecularity का समान नही होता है। उसे Non-elementry reaction कहते है। जैसे

उदा० ⇒

$$H_2 + Br_2 \longrightarrow 2HBr$$

$$-r_{H_2} = \frac{k_1 [H_2]^{1/2}}{1 + k_2 \frac{(HBr)}{(Br_2)^{1/2}}}$$

यहाँ पर molecularity का मान 2 है। और order का कोई निश्चित मान नहीं है। इस प्रकार की reaction Non-elementry reaction कहलाती है।

Difference between elementry and Non-elementry Reaction

	Elementry Reaction	Non-elementry Reaction
1.	यह Single step reaction है।	यह multiple reaction step reaction है।
2.	यह nature में Simple होती है।	यह nature में Complex होती है।
3.	elementry reaction में order reactant के stichiometric Coefficient के बराबर होते हैं।	Non-elementry reaction में order stichiometric coefficient से भिन्न ~~होती~~ होते हैं।
4.	elementry reaction का order एक पूर्णांक संख्या होती है।	इसका order एक भिन्नात्मक संख्या होती है।
5.	$H_2O_2 + H_2 \longrightarrow 2H_2O$	$H_2 + Br_2 \longrightarrow 2HBr$

(i) Homogeneous reaction ⇒ वह ch. reaction जिसमें सभी reactant व product एक ही अवस्था में उप० रहते हैं। उसे homogeneous reaction कहते हैं।

$$H_2(g) + Cl_2(g) \longrightarrow 2HCl(g)$$
$$CO(g) + \frac{1}{2}O_2(g) \longrightarrow CO_2(g)$$

(ii) Hetrogeneous reaction ⇒ वह ch. reaction जिसमें सभी reactant व product दो या दो से अधिक अवस्था में

उपस्थित रहते है। उसे hetrogeneous reaction कहते है।

उदा० ⇒

$$C(s) + O_2(g) \longrightarrow CO_2(g)$$
$$S(s) + O_2(g) \longrightarrow SO_2(g)$$
$$CaCO_3(s) \longrightarrow CaO(s) + CO_2(g)$$
$$CaO(s) + H_2O(l) \longrightarrow Ca(OH)_2(l)$$

Temperature dependency of Rate Constant ⇒

किसी रासायनिक अभिक्रिया में rate Constant का मान मुख्य रूप से Temp. पर निर्भर करता है। Rate Constant की Temp. पर निर्भरता का मान ज्ञात करने के लिए तीन theory का प्रयोग किया जाता है।

(i) Arrhenius theory ⇒ Arrhenius theory के अनुसार किसी ch. reaction में rate Constant का मान temp. का exponential function (चरघातांकीय फलन) होता है। और निम्न सूत्र द्वारा show किया जाता है।

$$k = A e^{-\left(\frac{E}{RT}\right)} \quad \text{—(i)}$$

k = Rate Constant
E = Activation energy
A = frequency factor
R = Universal gas Constant
T = Temp.; K

$$R = 8.314 \ \frac{\text{Joule}}{\text{gram mole} \cdot K}$$

इस theory का प्रयोग ch. reaction में Activation energy का मान ज्ञात करने के लिए किया जाता है।

समी० —(i) का लघुगणक लेने पर

$$\cancel{\ln k = \ln A - \frac{E}{RT}}$$

$$\ln k = \ln A e^{\left(-\frac{E}{RT}\right)}$$

antilog लेने पर

$$\ln K = \ln A + \left[-\frac{E}{RT}\right]$$

$$\ln K = \ln A - \frac{E}{RT}$$

$\log_e x$

$x = \ln e$

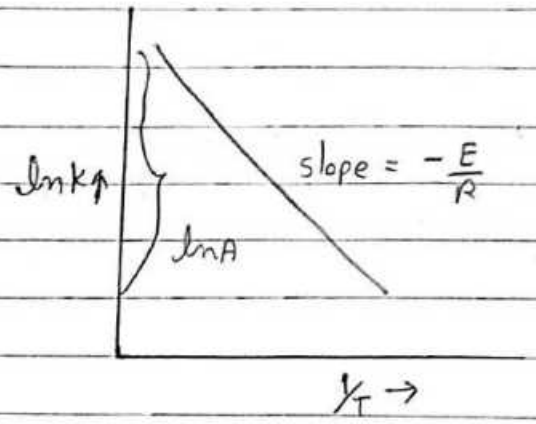
$\ln e = 1$

जब $\ln k$ और $1/T$ में ग्राफ बनाया जाता है। तो एक सरल रेखा प्राप्त होती है जिसका slope $= -\frac{E}{R}$ के बराबर होता है। intercept $\log A$ के बराबर ~~कटता~~ होता है।

$y = mx + c$

$\ln k = \ln A - \frac{E}{RT}$

$y = \ln k$ $\quad m = -\frac{E}{R}$ $\quad x = \frac{1}{T}$



k_1 = Rate constant at temp. T_1

k_2 = Rate constant at temp. T_2

$$\ln k_1 = \ln A - \frac{E}{RT_1} \quad \text{—— (ii)}$$

$$\ln k_2 = \ln A - \frac{E}{RT_2} \quad \text{—— (iii)}$$

On substracting eqn (ii) from eqn (iii)

$$\ln k_2 - \ln k_1 = -\frac{E}{RT_2} + \frac{E}{RT_1}$$

$$\boxed{\ln \frac{k_2}{k_1} = -\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)}$$

(ii) Collision theory ⇒ इस theory के अनुसार किसी भी रासायनिक अभिक्रिया की दर reactant के molecules के आपस में टकराने की दर पर निर्भर करती है। तथा किसी रासायनिक अभिक्रिया में molecules लगातार आपस में टकराते रहते हैं। और यदि उनकी energy activation

(A) + B ⟶ (A)(B) ⟶ product

1 mole में अणुओं की संख्या Avogadro Number के बराबर होता है।
6.023×10^{23}

energy के बराबर या उससे अधिक होती है तो product में convert हो जाती है। ~~यदि E.E. कम होती तो reactant में पुनः Dissociate हो जाते हैं।~~

Consider A chemical reaction

$$A + B \longrightarrow \text{products}$$

$-r_{AB}$ = rate of chemical reaction between reactant A and reactant B

$$Z_{AB} = \left(\frac{\sigma_A + \sigma_B}{2}\right)^2 n_A n_B \sqrt{8\pi kT\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}\right)}$$

σ_A = diameter of molecules of reactant A
σ_B = diameter of molecules of reactant B
n_A = number of molecules of reactant A per cm^3
n_B = number of molecules of reactant B per cm^3
M_A = Mass of A molecules of reactant A
M_B = Mass of A molecules of reactant B
C_A = Conc of reactant A
C_B = Conc of reactant B

1 mole में अणुओं की संख्या

$$n_A = \frac{NC_A}{10^3} \qquad n_B = \frac{NC_B}{10^3}$$

$1 m^3 = 1000$ litre

1 lit. में अणुओं की संख्या निकालने

N = Avagadro number = 6.023×10^{23}

$$\boxed{C_A = \frac{\text{moles}}{\text{litre}}}$$

1 litre moles में conc C_A

1 litre = $10^3 cm^3$

$$Z_{AB} = \left(\frac{\sigma_A + \sigma_B}{2}\right)^2 \frac{N^2 C_A C_B}{10^6} \sqrt{8\pi kT\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}\right)}$$

$$f = e^{-\left(\frac{E}{RT}\right)}$$

$$-r_{AB} = Z_{AB} \cdot f$$

जहाँ f = fraction factor of molecules having energy greater than or equal to activation energy.

rate of reaction का मान = fraction पर निर्भर करता है। अणुओं की टकराने की दर पर निर्भर करता है। कुल अणुओं का fraction जिनकी ऊर्जा activation energy के बराबर या उससे अधिक होती है।

$$-r_{AB} = \left(\frac{\sigma_A + \sigma_B}{2}\right)^2 \frac{N^2 C_A C_B}{10^6} \sqrt{8\pi kT\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}\right)} e^{-\frac{E}{RT}}$$

$$-r_{AB} = k' C_A C_B \quad \text{—— (ii)}$$

rate of reaction का मान Conc की form में

k' = rate Constant

from eqn (i) and (ii)

$$k' \cancel{C_A C_B} = \left(\frac{\sigma_A + \sigma_B}{2}\right)^2 \frac{N^2 \cancel{C_A C_B}}{10^6} \sqrt{8\pi kT\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}\right)} \times e^{-\frac{E}{RT}}$$

$$k' = \left(\frac{\sigma_A + \sigma_B}{2}\right)^2 \frac{N^2}{10^6} \sqrt{8\pi kT\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}\right)} \times e^{-\frac{E}{RT}}$$

constant नगण्य मानने पर

$$k' \propto \sqrt{T}\, e^{-\left(\frac{E}{RT}\right)}$$

Temp. dependency of rate Constant According to Collision theory.

(iii) Transition state theory ⇒ इस Theory के अनुसार जब किसी chemical reaction होती है। तो यह दो stage में होती है। पहली stage में reactant A व B molecule अभिक्रिया करके एक transition complex (AB^*) बनाते है। और Second stage में यह transition Complex Constant rate से product में decompose हो जाता है।

chemical reaction

$$A + B \longrightarrow \text{products}$$

Ist stage : $A + B \rightleftharpoons AB^*$ (Transition Complex)

IInd stage $AB^* \longrightarrow$ products

$-r_{AB}$ = rate of chemical reaction between reactant A and reactant B

$[A]$ = Concentration of reactant A

$[B]$ = Concentration of reactant B

$[AB^*]$ = Concentration of transition Complex AB^*

Boltzman constant $\left(\frac{kT}{h}\right)$ = rate of decomposition of transition Complex

K_c = equilibrium Constant

k = boltzman constant $\left(\frac{R}{N_A}\right) = \frac{8.314}{6.022 \times 10^{23}} = 1.38 \times 10^{-23}$ $\frac{J}{mole\ molecule\ K}$

h = planck Constant = 6.6×10^{-34} Joule-seconds

reactant A और reactant B की संख्या को 2 factor से निर्भर करता है।

(i) पहला factor Concentration of transition Complex

(ii) दूसरा factor rate of decomposition of transition Complex

$$-r_{AB} = [AB^*]\left(\frac{kT}{h}\right) \quad \text{--- (i)}$$

$$K_c = \frac{[AB^*]}{[A][B]} \quad \text{--- (ii)}$$

$$[AB^*] = K_c [A][B] \quad \text{--- (iii)}$$

$A + B \rightleftharpoons C + D$

$K_c = \frac{[C][D]}{[A][B]} = \frac{\text{products की Conc}}{\text{reactants की Conc}}$

अभी (i) में eq^n (iii) का मान रखने पर

$$-r_{AB} = K_c [A][B] \frac{kT}{h} \quad \text{--- (iv)}$$

from thermodynamics

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K_c$$

ΔG = change in Gibbs free energy

$$\ln K_c = -\frac{\Delta G}{RT}$$ anti log (i) ⇒

$$K_c = e^{-\frac{\Delta G}{RT}}$$

$$-r_{AB} = e^{\left(-\frac{\Delta G}{RT}\right)} [A][B] \frac{kT}{h} \quad \text{--- (v)}$$

from Thermodynamics

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

on dividing both sides by RT

$$\frac{\Delta G}{RT} = \frac{\Delta H}{RT} - \frac{\Delta S}{R}$$

$$\frac{\Delta G}{RT} = \frac{\Delta H}{RT} - \frac{\Delta S}{R}$$

$$-r_{AB} = e^{-\frac{\Delta H}{RT}} e^{\frac{\Delta S}{R}} [A][B] \frac{kT}{h} \quad \text{--- (vi)}$$

from thermodynamics

$\Delta H = E + PV$

$$\Delta H = E + PT$$ $PV = nRT$, $PV = RT$, $n = 1$

dividing both sides by RT ⇒

$$\frac{\Delta H}{RT} = \frac{E}{RT} + 1 \quad \text{--- (vii)}$$

ΔH = change in enthalpy

ΔS = change in entropy

समी. (6) में उपरोक्त पर

$$-r_{AB} = e^{-\frac{E}{RT}} e^{-1} e^{\frac{\Delta S}{R}} [A][B] \frac{kT}{h}$$

$$-r_{AB} = e^{-\frac{E}{RT}} e^{\frac{\Delta S}{R} - 1} C_A C_B \left(\frac{kT}{h}\right) \quad \text{--- (viii)}$$

$$-r_{AB} = k' C_A C_B \quad \text{--- (ix)}$$

k' = Rate const.

from eqn (viii) and (ix)

$$k' C_A C_B = e^{\frac{-E}{RT}} \, e^{\frac{\Delta S}{R} - 1} \, C_A C_B \, \frac{kT}{h}$$

$$k' = \left(\frac{kT}{h}\right) e^{\frac{\Delta S}{R} - 1} \, e^{\frac{-E}{RT}}$$

$$\boxed{k' \propto T e^{-\left(\frac{E}{RT}\right)}}$$

Temp. dependency of rate Constant according to transition state theory.

⇒ Comparision between Arhenious, collosion, transition state theory

सामान्य रूप में

$$K' \propto T^m e^{-E/RT}$$

According to arhenious theory

$m = 0$

$$k' \propto T^0 e^{-\frac{E}{RT}} \qquad \boxed{k' \propto e^{-\frac{E}{RT}}}$$

According to colloision theory

$m = 1/2$ रखने पर

$$k' \propto T^{1/2} e^{-E/RT}$$

$$\boxed{k' \propto \sqrt{T} e^{-\frac{E}{RT}}}$$

~~Ar~~

According to transition state theory

$m = 1$

$$k' \propto T^1 e^{-E/RT}$$

$$\boxed{k' \propto T e^{-E/RT}}$$

(एक ch. reaction जिसकी rate का मान 500K पर 400K की तुलना में rate का मान 10 गुना अधिक है।)

Q1. At 500K the rate of a by molecular reaction is 10 time. of the rate at 400k. find the activation energy for this reaction. (Arhenuis Theory, Collision, transition state theory)

Ans. given data

$T_1 = 400K$ $\quad$ $T_2 = 500K$

$k_1 = k_1$ $\quad$ $k_2 = 10k_1$

(i) Arhenuis theory

$$\log \frac{k_2}{k_1} = -\frac{E_a}{RT}\left[\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right]$$

$$\log \frac{10\cancel{k_1}}{\cancel{k_1}} = -\frac{E_a}{RT}\left[\frac{1}{500} - \frac{1}{400}\right]$$

$$\log_e 10 = \frac{-E_a}{8.314}\left[\frac{1}{500} - \frac{1}{400}\right]$$

$$\log_e 10 = -\frac{E_a}{8.314}\left[\frac{400-500}{500\times400}\right] \qquad \{\log 10 = 2.3025$$

$$2.3025 = +\frac{E}{8.314}\left[+\frac{1\cancel{00}}{200\cancel{00}}\right]$$

$$2.3025 = \frac{E}{8.314\times2000}$$

$E = 2.3025 \times 8.314 \times 2000$

$E = 38285.97$ Joule

(ii) Collision theory ⇒

$$k \propto \sqrt{T}\, e^{\left(-\frac{E}{RT}\right)}$$

$$k = k_0 \sqrt{T}\, e^{\left(-\frac{E}{RT}\right)}$$

$$\ln k = \ln k_0 + \ln\sqrt{T} - \frac{E}{RT}$$

$$\ln k_1 = \ln k_0 + \ln\sqrt{T_1} - \frac{E}{RT_1}$$

$$\ln k_2 = \ln k_0 + \ln \sqrt{T_2} - \frac{E}{RT}$$

$$\ln k_2 - \ln k_1 = \ln \sqrt{T_2} - \ln \sqrt{T_1} - \frac{E}{RT_2} + \frac{E}{RT_1}$$

$$\ln\left(\frac{k_2}{k_1}\right) = \ln \sqrt{\frac{T_2}{T_1}} - \frac{E}{R}\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$$

$k_1 = 10 k_2$

$\frac{k_1}{k_2} = 10$

$$\ln 10 = \ln \sqrt{\frac{500}{400}} - \frac{E}{8.314}\left(\frac{1}{500} - \frac{1}{400}\right)$$

$$\ln 10 = \ln \sqrt{1.25} - \frac{E}{8.314}\left(\frac{1}{500} - \frac{1}{400}\right)$$

$$\ln 10 = \ln \sqrt{1.25} - \frac{E}{8.314}\left(\frac{4-5}{2000}\right)$$

$$\ln 10 = \ln \sqrt{1.25} - \frac{E}{8.314}\left(\frac{-1}{2000}\right)$$

$$\ln 10 = \cancel{\ln \sqrt{1.25}}\ \ln 1.118 + \frac{E}{8.314 \times 2000}$$

$$2.3025 = 0.1115 + \frac{E}{8.314 \times 2000}$$

$$\frac{E}{8.314 \times 2000} = 2.191$$

$$E = 8.314 \times 2000 \times 2.191$$

$$E = 36431.948 \text{ Joule}$$

(iii) Transition state theory $\Rightarrow$

$$k \propto T e^{-\frac{E}{RT}}$$

$$k = k_0 T e^{-\frac{E}{RT}}$$

$$\ln k = \ln k_0 + \ln T - \frac{E}{RT}$$

$$\ln k_1 = \ln k_0 + \ln T_1 - \frac{E}{RT_1}$$

$$\ln k_2 = \ln k_0 + \ln T_2 - \frac{E}{RT_2}$$

$$\ln k_2 - \ln k_1 = \ln T_2 - \ln T_1 - \frac{E}{RT_2} + \frac{E}{RT_1}$$

$$\ln \frac{k_2}{k_1} = \ln \left(\frac{T_2}{T_1}\right) - \frac{E}{R}\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$$

$$\ln 10 = \ln \frac{500}{400} - \frac{E}{8.314}\left(\frac{1}{500} - \frac{1}{400}\right)$$

$$\ln 10 = \ln 1.25 - \frac{E}{8.314}\left(\frac{4-5}{2000}\right)$$

$$2.3025 = 0.2231 + \frac{E}{8.314 \times 2000}$$

$$\frac{E}{8.314 \times 2000} = 2.0795$$

$$E = 8.314 \times 2000 \times 2.0795$$

$$E = 34576.926 \text{ Joule}$$

Chapter = 3 Constant volume batch reactor

Kamal Patel

Constant volume batch reactor ⇒ Constant volume batch reactor एक ऐसा reactor है जिसका प्रयोग chemical Industrijes में reactant को product में Convert करने के लिए किया जाता है। इसमें एक खाली पात्र का Use किया जाता है। जिसमें reactant को भर दिया जाता है और reaction को start कर दिया जाता है जैसे - जैसे reaction आगे बढ़ती जाती है वैसे - वैसे reactant product में Convert हो जाते है तो reactant की Conc लगातार कम होती जाती है और product की Conc लगातार बढ़ती जाती है। कुछ समय पश्चात product व unconverted reactant को reactor से बाहर निकाल लिया जाता है। और नया reactant को भर दिया जाता है यहाँ पर reactant के fractional Conversion का जो मान प्राप्त होता है। वह time पर निर्भर करता है तथा वह eqn जो reactant के fractional Conversion और time में संबंध बताती है वह Constant volume batch reactor की design eqn कहलाती है इसका भाव निम्न प्रकार से ज्ञात किया जाता है।

$$\boxed{A \rightarrow R}$$

Consider A chemical Reaction $A \rightarrow R$ taking place in A Constant volume batch reactor

N_{A_0} = Number of moles of reactant A present at time $t = 0$

N_A = Number of moles of reactant A present at time $t = t$

C_{A_0} = Conc of reactant A at time $t = 0$

C_A = Conc of reactant A at time $t = t$

V = Volume of Constant volume batch reactor

X_A = fractional Conversion of reactant A

k = Rate Constant

n = order of chemical reaction.

rate of reaction का मान Conc की घात के समानुपाती होता है।

$-r_A$ = Rate of ch. reaction of reactant A

$$-r_A = -\frac{1}{V}\left(\frac{dN_A}{dt}\right) = kC_A^n \quad \text{—(i)}$$

fractional conversion of reactant A

$$X_A = \frac{N_{A_0} - N_A}{N_{A_0}} \quad \left\{ \frac{\text{(जितने mole product में बदल गये)}}{\text{Total mole}} \right.$$

$$N_{A_0} - N_A = N_{A_0} X_A$$

$$N_A = N_{A_0} - N_{A_0} X_A$$

$$N_A = N_{A_0}(1 - X_A) \quad \text{—(ii)}$$

अवकलन करने पर

$$\frac{dN_A}{dt} = -N_{A_0}\left(\frac{dX_A}{dt}\right) \quad \text{—(iii)}$$

$$C_A = \frac{N_A}{V}$$

$$C_A = \frac{N_{A_0}(1 - X_A)}{V} \qquad \frac{N_{A_0}}{V} = C_{A_0}$$

$$C_A = C_{A_0}(1 - X_A) \quad \text{—(iv)}$$

समी० (3) व (4) का मान समी. (i) में रखने पर

$$\frac{N_{A_0}}{V}\frac{dX_A}{dt} = kC_{A_0}^n(1 - X_A)^n$$

$$C_{A_0}\left(\frac{dX_A}{dt}\right) = kC_{A_0}^n(1 - X_A)^n$$

$$\frac{dX_A}{dt} = \frac{kC_{A_0}^n}{C_{A_0}}(1 - X_A)^n$$

$$\frac{dX_A}{dt} = kC_{A_0}^{n-1}(1 - X_A)^n$$

जब reactor ~~फिक्स~~ volume reaction के दौरान Constant रहता है Constant volume Batch reactor कहलाता है।

$$r_i = \frac{1}{V}\frac{dN_i}{dt} \qquad r_A = -\frac{1}{RT}\frac{dP_A}{dt}$$

time = 0 $\quad X_A = 0$

time = t $\quad X_A = X_A$

$$k C_{A_0}^{n-1}\, dt = \frac{dX_A}{(1-X_A)^n}$$

$$k C_{A_0}^{n-1} \int_0^t dt = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1-X_A)^n}$$

$$k C_{A_0}^{n-1}\, t = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1-X_A)^n}$$

$$\boxed{t = \frac{1}{k C_{A_0}^{n-1}} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1-X_A)^n}}$$

Design eqn for n^{th} order chemical reaction taking place in A Constant volume batch reactor

⇒ <u>For zero order chemical reaction $n=0$</u>

$$t = \frac{1}{k C_{A_0}^{0-1}} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1-X_A)^0}$$

$$t = \frac{1}{k C_{A_0}^{-1}} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1-X_A)^0} \qquad \left\{ \because (1-X_A)^0 = 1 \right.$$

$$t = \frac{C_{A_0}}{k} \int_0^{X_A} dX_A$$

$$t = \frac{C_{A_0}}{k} \left[X_A \right]_0^{X_A}$$

$$t = \frac{C_{A_0}}{k} \left[X_A - 0 \right]$$

$$t = \frac{C_{A_0} X_A}{k}$$

$$\boxed{C_{A0} X_A = kt}$$

rate expression for zero order chemical reaction taking place in a constant volume batch reactor

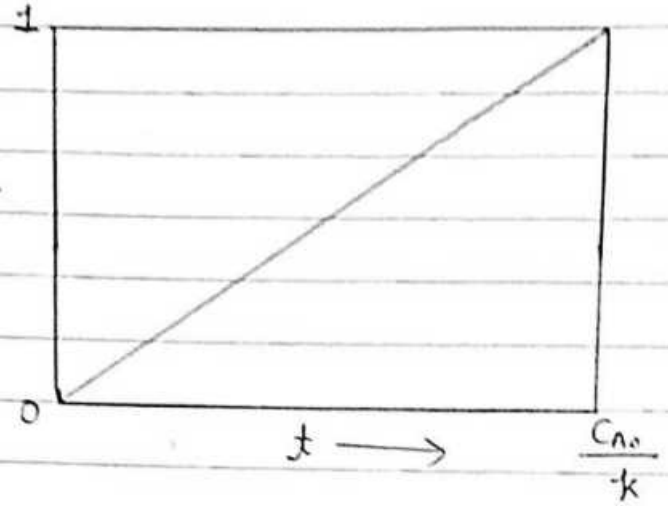
<u>Fractional conversion and time के बीच</u> → (X_A v/s t)

$t = 0 \quad X_A = 0$

$t = \frac{C_{A0}}{k} \quad X_A = 1$

$\cancel{C_{A0}} X_A = \cancel{k} \left(\frac{\cancel{C_{A0}}}{\cancel{k}} \right)$

$\boxed{X_A = 1.0}$



X_A = reactant + पिछली product में convert की हुआ है।

<u>For first order reaction $n = 1$</u> →

$$t = \frac{1}{k C_A^{n-1}} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1-X_A)^n}$$

$$t = \frac{1}{k C_{A0}^{0}} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{1-X_A}$$

$$t = \frac{1}{k} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{1-X_A}$$

$$t = \frac{1}{k} \left[-\ln(1-X_A) \right]_0^{X_A}$$

$$t = -\frac{1}{k} \left[\ln(1-X_A) - \ln 1 \right]$$

$\because \frac{dx}{a+bx} = -\frac{1}{b} \ln(a+bx)$

$\because \ln 1 = 0$

$e^{\infty} = \infty$

$e^{-\infty} = 0$

$\frac{1}{e^{\infty}} = \frac{1}{\infty} = 0$

$$t = \frac{-\ln(1 - X_A)}{k}$$

$$-\ln(1 - X_A) = kt$$

$$\ln(1 - X_A) = -kt \qquad \text{anti log लेने पर}$$

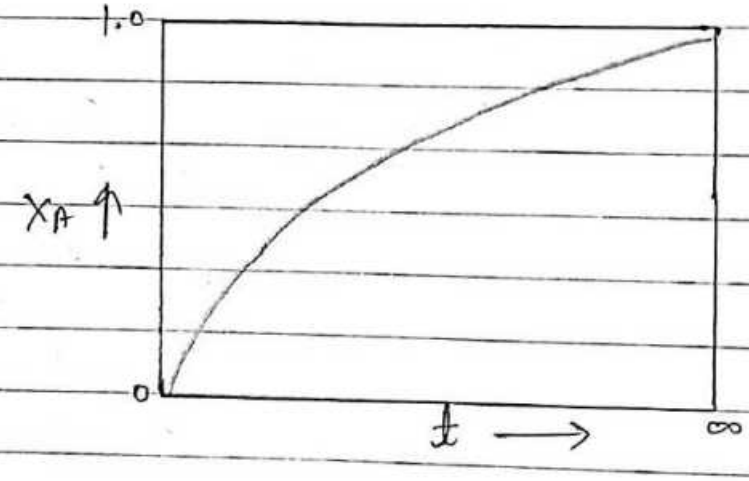
$$1 - X_A = e^{-kt}$$

$$\boxed{X_A = 1 - e^{-kt}}$$

rate expression for first order chemical reaction taking place in A constant volume batch reactor

$t = 0 \qquad X_A = 0$

$t = \infty \qquad X_A = 1.0$



For second order chemical reaction $n = 2 \Rightarrow$

$$t = \frac{1}{k C_{A_0}^{n-1}} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1 - X_A)^n}$$

$$t = \frac{1}{k C_{A_0}^{2-1}} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1 - X_A)^2}$$

$1 - X_A = t \qquad X_A = 0 \qquad t = 1$

$-dX_A = dt \qquad X_A = X_A \qquad t = t$

$dX_A = -dt$

$$t = -\frac{1}{k C_{A_0}} \int_1^{t} \frac{dt}{t^2}$$

$$t = -\frac{1}{kC_{A0}}\left[-\frac{1}{t}\right]_1^t$$

$$t = \frac{1}{kC_{A0}}\left[\frac{1}{t}\right]_1^t$$

$$t = \frac{1}{kC_{A0}}\left[\frac{1}{t} - 1\right]$$

t का मान रखने पर

$$t = \frac{1}{kC_{A0}}\left[\frac{1}{1-X_A} - 1\right]$$

$$t = \frac{1}{kC_{A0}}\left[\frac{\cancel{1} - \cancel{1} + X_A}{1-X_A}\right]$$

$$t = \frac{1}{kC_{A0}}\left[\frac{X_A}{1-X_A}\right]$$

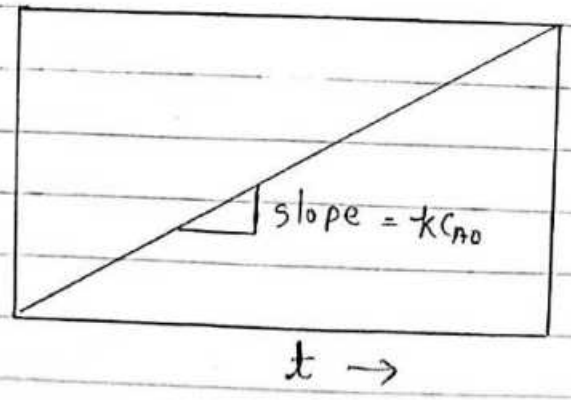
$$\boxed{\frac{X_A}{1-X_A} = kC_{A0}t}$$

Rate expression for second order chemical reaction taking place in A Constant volume batch reactor.

$$\frac{X_A}{1-X_A} = y$$

$$t = x \qquad kC_{A0} = m$$

$$y = mx + c$$



For Third order chemical reaction $n=3$ ⇒

$$t = \frac{1}{k C_{A0}^{n-1}} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1-X_A)^n}$$

$$t = \frac{1}{k C_{A0}^{2}} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1-X_A)^3}$$

$$1 - X_A = t$$

$$-dX_A = dt$$

$$dX_A = -dt$$

$$\int x^n \, dx = \frac{x^{n+1}}{n+1}$$

$$n = -3$$

$$\frac{x^{-3+1}}{-3+1} = \frac{1}{-2x^2} = x^{-2}$$

$$t = -\frac{1}{k C_{A0}^{2}} \int_1^{t} \frac{dt}{t^3}$$

$$t = -\frac{1}{k C_{A0}^{2}} \left[\frac{-1}{2t^2} \right]_1^t$$

$$t = \frac{1}{2 k C_{A0}^{2}} \left[\frac{1}{t^2} \right]_1^t$$

$$t = \frac{1}{2 k C_{A0}^{2}} \left[\frac{1}{t^2} - 1 \right]$$

t का मान रखने पर

$$t = \frac{1}{2 k C_{A0}^{2}} \left[\frac{1}{(1-X_A)^2} - 1 \right]$$

$$t = \frac{1}{2 k C_{A0}^{2}} \left[\frac{1-(1-X_A)^2}{(1-X_A)^2} \right]$$

$$(a-b)^2 = (a^2 - 2ab + b^2)$$

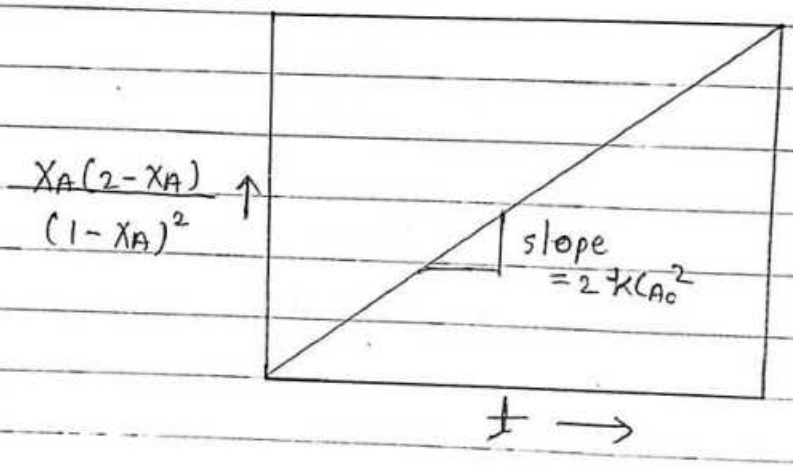
$$t = \frac{1}{2kC_{A_0}^2}\left[\frac{1-(1-2X_A+X_A^2)}{(1-X_A)^2}\right]$$

$$t = \frac{1}{2kC_{A_0}^2}\left[\frac{2X_A - X_A^2}{(1-X_A)^2}\right]$$

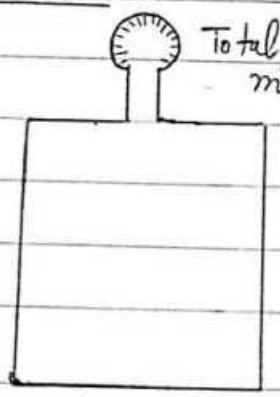
$$t = \frac{1}{2kC_{A_0}^2}\left[\frac{X_A(2-X_A)}{(1-X_A)^2}\right]$$

$$\boxed{\frac{X_A(2-X_A)}{(1-X_A)^2} = 2kC_{A_0}^2 t}$$

Rate expression for third order chemical reaction taking place in A Constant volume batch reactor



Analysis of kinetic data obtained from constant volume batch reactor ⇒



Constant volume batch reactor

किसी भी Constant volume batch reactor का प्रयोग किसी भी chemical reaction के लिए order व Rate Constant का मान ज्ञात करने के लिए किया जाता है। इसमें एक Constant volume batch reactor का

प्रयोग किया जाता है। इसमें reactant को भर दिया जाता है। और reaction start कर दी जाती है। जैसे - जैसे reaction आगे बढ़ती जाती है वैसे - वैसे reactant का कुछ भाग product में Convert हो जाता है तथा reaction mix. total pressure समय के साथ परिवर्तित होता जाता है यहाँ पर total pressure को एक pressure measurement instrument की सहायता से measure किया जाता है। और Total pressure को reactant की conc में परिवर्तित किया जाता है। इसके पश्चात Intergral व differential method का use करते हुए chemical reaction के लिए order व rate Constant का मान ज्ञात किया जाता है। इसके लिए eqn निम्न प्रकार से show की जाती है।

Consider the following chemical reaction taking in A constant Volume batch reactor :

$$aA + bB + cC + \text{----------} \gamma R + sS + tT + \ldots$$

$t=0$	N_{A_0}	N_{B_0}	N_{C_0}		N_{R_0}	N_{S_0}	N_{T_0}
$t=t$	N_A	N_B	N_C		N_R	N_S	N_T
	$(N_{A_0} - ax)$	$(N_{B_0} - bx)$	$(N_{C_0} - cx)$		$(N_{R_0} + \gamma x)$	$(N_{S_0} + Sx)$	$(N_{T_0} + tx)$

x = कुछ मात्रा है।

N_{A_0} = number of moles of reactant A present at time $t=0$

N_A = number of moles of reactant A present at time $t=t$

N_0 = total number of moles of reactants and products present at time $t=0$

N = total number of moles of reactants and products present at time $t=t$

V = Volume of the constant volume batch reactor.

π_0 = total pressure of reaction mix. at time $t=0$

π = total pressure of reaction mix. at time $t=t$

C_{A0} = Conc of reactant A at time $t = 0$

C_A = Conc of reactant A at time $t = t$

Δn = (total number of moles of products) − (Total number of moles of reactants)

$\Delta n = (r + s + t + \dots) - (a + b + c + \dots)$

$N_0 = N_{A0} + N_{B0} + N_{C0} + \dots + N_{R0} + N_{S0} + \dots$

$N = N_A + N_B + N_C + \dots$

$N = (N_{A0} - ax) + (N_{B0} - bx) + (N_{C0} - cx) + \dots (N_{R0} + rx) + (N_{S0} + sx) + \dots$

$N = (N_{A0} + N_{B0} + N_{C0} + \dots + N_{R0} + N_{S0} + \dots) + (rx + sx + \dots) - (ax + bx + cx + \dots)$

$N = N_0 + x[(r + s + \dots) - (a + b + c)]$

$N = N_0 + x\Delta n$

$x\Delta n = N - N_0$

$$\boxed{x = \frac{N - N_0}{\Delta n}}$$

$\left\{ \because C_A = \frac{N_A}{V} \right\}$

$N_A = N_{A0} - ax$

$C_A = \frac{N_{A0} - ax}{V}$

$C_A = \frac{N_{A0}}{V} - \frac{ax}{V}$ $\left\{ \frac{N_{A0}}{V} = C_{A0} \right\}$

$C_A = C_{A0} - \left(\frac{ax}{V}\right)$

$C_A = C_{A0} - \frac{a}{V}\left(\frac{N - N_0}{\Delta n}\right)$ x का मान रखने पर

from ideal gas equation

$$PV = nRT$$

$t = 0$ $\quad p = \pi_0 \quad n = N_0$

$t = t$ $\quad p = \pi \quad n = N$

$$\pi_0 V = N_0 RT$$

$$\pi V = NRT$$

$$N_0 = \frac{\pi_0 V}{RT} \qquad N = \frac{\pi V}{RT}$$

$$C_A = C_{A0} - \left(\frac{a}{V}\right)\left(\frac{1}{\Delta n}\right)\left[\frac{\pi V}{RT} - \frac{\pi_0 V}{RT}\right]$$

$$C_A = C_{A0} - \left(\frac{a}{\cancel{V}}\right)\left(\frac{1}{\Delta n}\right)\left(\frac{\cancel{V}}{RT}\right)(\pi - \pi_0)$$

$$\boxed{C_A = C_{A0} - \frac{a}{\Delta n}\left(\frac{\pi - \pi_0}{RT}\right)}$$

eq^n for conc of reactant A in term of total pressure of the reaction mixture.

Intergal method of analysis of kinetic data obtained from Constant volume batch reactor → इस का प्रयोग किसी भी ch. reaction के लिए order और rate Constant का मान ज्ञात करने के लिए किया जाता है। इस method सबसे पहले से rate eq^n की form assume की जाती है। और इसके पश्चात eq^n का Intergation करके Conc व time में संबंध निकाला जाता है। इसकी तुलना experiment प्राप्त data से की जाती है। और इसके पश्चात order और rate Constant का मान ज्ञात किया जाता है।

from all rate equation $\qquad f(C_A) = C_A^n$

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = -k\, f(C_A)$$

C_A function

$$\int \frac{-dC_A}{f(C_A)} = \int -k\, dt$$

$$\int \frac{-dC_A}{f(C_A)} = -k\, t$$

$$t = -\frac{1}{k} \int \frac{-dC_A}{f(C_A)}$$

S. No	Time	π	C_A	$\frac{1}{C_A}$	$\frac{1}{C_A^2}$
1.	$t = 0$	π_0	C_{A0}	$\frac{1}{C_{A0}}$	$\frac{1}{C_{A0}^2}$
2.	$t = t_1$	π_1	C_{A1}	$\frac{1}{C_{A1}}$	$\frac{1}{C_{A1}^2}$
3.	$t = t_2$	π_2	C_{A2}	$\frac{1}{C_{A2}}$	$\frac{1}{C_{A2}^2}$
4.	$t = t_3$	π_3	C_{A3}	$\frac{1}{C_{A3}}$	$\frac{1}{C_{A3}^2}$

$$C_A = C_{A0} - \frac{a}{\Delta n}\left(\frac{\pi - \pi_0}{RT}\right)$$

$$-r_A = -\frac{1}{V}\frac{dN_A}{dt} = -kC_A^n$$

$$-r_A = -\frac{d}{dt}\left(\frac{N_A}{V}\right) = -kC_A^n$$

$$-\frac{dC_A}{dt} = -kC_A^n$$

Intergrated Rate Equation for different Order Reactions :-

Assume order of chemical reaction $n = 0$

$$-\frac{dC_A}{dt} = kC_A^0 \qquad C_A^0 = 1$$

$$-\frac{dC_A}{dt} = k$$

$$-dC_A = k\,dt$$

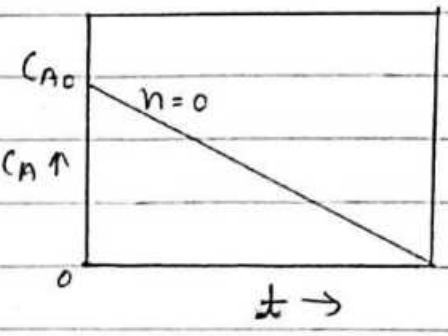
$$-\int_{C_{A0}}^{C_A} dC_A = k\int_0^t dt$$

$$-[C_A]_{C_{A0}}^{C_A} = kt$$

$$-[C_A - C_{A0}] = kt$$

$$C_{A0} - C_A = kt$$

$$\boxed{C_A = C_{A0} - kt}$$



Assume order of chemical reaction $n = 1$

$$-\frac{dC_A}{dt} = kC_A^1$$

$$-\frac{dC_A}{dt} = \cancel{k\,dC_A}\ kC_A$$

$$-\int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A} = k\int_0^t dt \qquad \cancel{-\ln\frac{C_A}{C_{A0}} = kt}$$

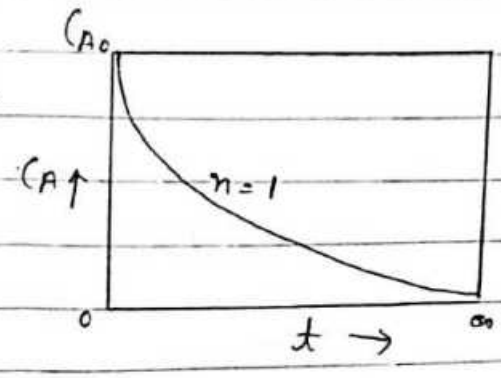
$$-[\ln C_A]_{C_{A0}}^{C_A} = kt$$

$$-[\ln C_A - \ln C_{A0}] = kt$$

$$\ln\frac{C_A}{C_{A0}} = -kt$$

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = e^{-kt}$$

$$\boxed{C_A = C_{A0}\,e^{-kt}}$$



$$\int x^n dx = \frac{x^{n+1}}{n+1}$$

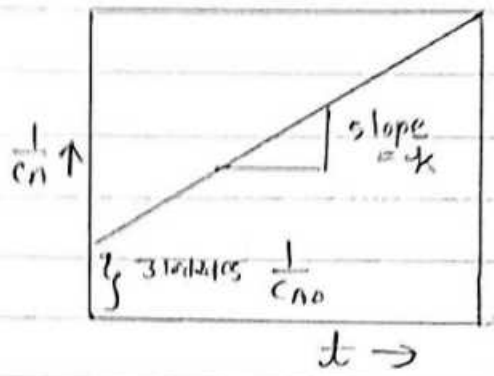
Assume order of chemical reaction $n=2$

$$-\frac{dC_A}{dt} = kC_A^2$$

$$-\frac{dC_A}{C_A^2} = k\,dt$$

$$-\int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A^2} = k\int_0^t dt$$

$$\left[\frac{1}{C_A}\right]_{C_{A0}}^{C_A} = kt$$



$$\left[\frac{1}{C_A}\right]_{C_{A0}}^{C_A} = kt$$

$$\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A0}} = kt \qquad \boxed{\frac{1}{C_A} = \frac{1}{C_{A0}} + kt}$$

Assume order of chemical reaction $n=3$

$$-\frac{dC_A}{dt} = kC_A^3$$

$$-\frac{dC_A}{C_A^3} = k\,dt$$

$$-\int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A^3} = k\int_0^t dt$$

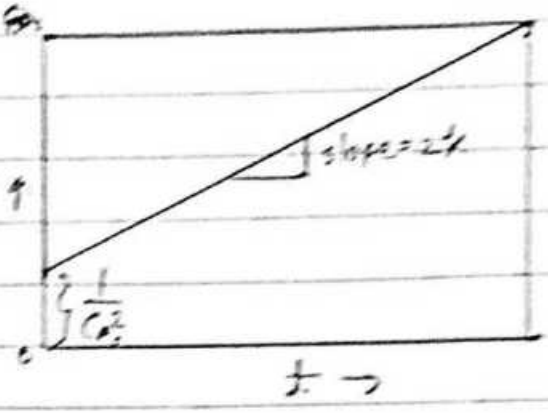
$$-\left[-\frac{1}{2C_A^2}\right]_{C_{A0}}^{C_A} = kt$$

$$\frac{1}{2}\left[\frac{1}{C_A^2}\right]_{C_{A0}}^{C_A} = kt$$

$$\frac{1}{2}\left[\frac{1}{C_A^2} - \frac{1}{C_{A_0}^2}\right] = k_2 t$$

$$\frac{1}{C_A^2} - \frac{1}{C_{A_0}^2} = 2k_2 t$$

$$\boxed{\frac{1}{C_A^2} = \frac{1}{C_{A_0}^2} + 2k_2 t}$$



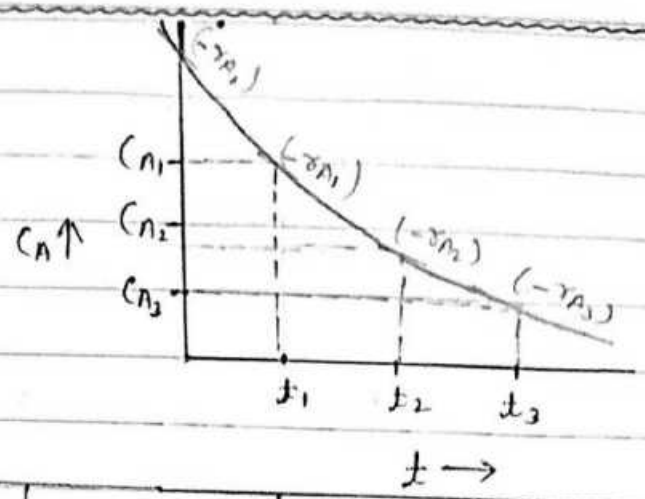
Differential method of Analysis ⇒ इस का प्रयोग किसी भी chemical reaction के लिए order और rate Constant का मान ज्ञात करने के लिए किया जाता है जैसे एक Constant volume batch reactor का प्रयोग किया जाता है। जिसमें ch. reaction करायी जाती है और reaction mix के total pressure/volume के साथ record किया जाता है और total pressure को reactant की Conc. में परिवर्तित किया जाता है। उसके बाद C_A व time से ग्राफ बनाया जाता है जो कि एक Smooth Curve के रूप में प्राप्त होता है। उसके पश्चात इस Curve का slope अलग - अलग समय पर ज्ञात किया जाता है जो कि rate of chemical reaction को show करता है। उसके बाद log (C_A व log(r)) में ग्राफ बनाया जाता है जो कि एक सरल रेखा के रूप में प्राप्त होता है। इस सरल रेखा के slope और अन्तःखण्ड की जानकारी से rate constant और order का मान ज्ञात किया जाता है।

S.No	Time	Total pressure (π)	Conc. of reactant A, C_A
1.	$t = 0$	π_0	C_{A_0}
2.	$t = t_1$	π_1	C_{A_1}
3.	$t = t_2$	π_2	C_{A_2}
4.	$t = t_3$	π_3	C_{A_3}

$$C_A = C_{A0} - \frac{q}{dm}\left(\frac{\pi - \pi_0}{RT}\right)$$

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt}$$

$$\frac{dC_A}{dt} = \text{slope } \tilde{\gamma}$$



S. No.	Time	C_A	$-r_A$	$\ln C_A$	$\ln(-r_A)$
1.	$t = 0$	C_{A0}	$-r_{A0}$	$\ln C_{A0}$	$\ln(-r_{A0})$
2.	$t = t_1$	C_{A1}	$-r_{A1}$	$\ln C_{A1}$	$\ln(-r_{A1})$
3.	$t = t_2$	C_{A2}	$-r_{A2}$	$\ln C_{A2}$	$\ln(-r_{A2})$
4.	$t = t_2$	C_{A3}	$-r_{A3}$	$\ln C_{A3}$	$\ln(-r_{A3})$

$$-r_A = kC_A^n$$

$$\ln(-r_A) = \ln k + n \ln C_A$$

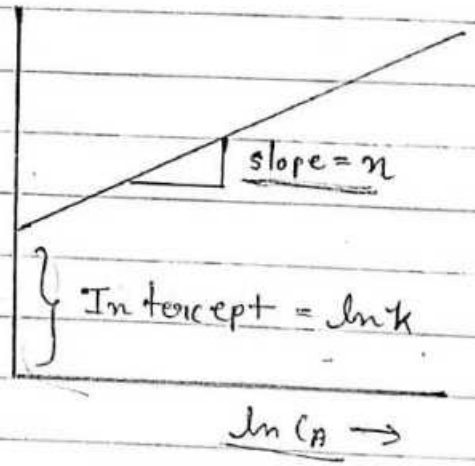
$$y = mx + c$$

$$y = \ln(-r_A)$$

$$x = \ln C_A$$

$$m = n$$

$$c = \ln k$$



order = n

Rate Concept = ln k

Q1. ⇒ liquid A decomposes by A first order kinetics and in A batch reactor 50% of A is Converted in A 5 min. run. how much longer would it take to reach 75% Conversion?

Ans. For first order ⇒

$$X_A = 1 - e^{-kt}$$

$$1 - X_A = e^{-kt}$$

e^{-kt} t = minute ~~k = unitless~~ $k = \frac{1}{min}$

$-r_A = kC_A^n$ $n=1$

$-r_A = kC_A$

$\frac{moles}{m^3 sec} = k \frac{moles}{m^3}$ $k = \frac{1}{sec}$

log ~~∂~~ k

$$\ln(1-X_A) = -kt$$

$$-\ln(1-X_A) = kt$$

$$k = \frac{-\ln(1-X_A)}{t}$$

$$\left\{ \frac{(50\%)}{100} = 0.50 \right.$$

$$k = \frac{-\ln(1-0.50)}{5}$$

$$k = \frac{-\ln(0.50)}{5}$$

$$k = \frac{-\ln\left(\frac{1}{2}\right)}{5}$$

$$\left\{ -\ln\frac{a}{b} = \frac{b}{a} \right.$$

$$k = \frac{-\ln(1)}{2 \times 5}$$

$$k = \frac{-\ln(1/2)}{5}$$

$$k = \frac{0.693}{5} = 0.1386 \text{ minute}^{-1}$$

$$t = \frac{-\ln(1-X_A)}{k} = \frac{-\ln(1-0.75)}{k}$$

$$t = \frac{-\ln(0.25)}{0.1386}$$

$$t = \frac{\ln 4}{0.1386} \quad t = \frac{1.386}{0.1386}$$

$t = 10$ minutes Ans.

~~Q2. liquid A decomposes by A Second & this~~

Q2. Repeat the previous problem for Second & third order kinetic order.

Ans.

$$\frac{X_A}{1-X_A} = kC_{A0}t$$

$$kC_{A0} = \frac{1}{t}\left[\frac{X_A}{1-X_A}\right]$$

$$kC_{A0} = \frac{1}{5}\left[\frac{0.50}{1-0.50}\right]$$

$$kC_{A0} = \frac{1}{5}\left[\frac{0.50}{0.50}\right]$$

$$kC_{A0} = 0.20$$

$$t = \frac{1}{kC_{A0}}\left[\frac{X_A}{1-X_A}\right]$$

$$t = \frac{1}{0.20}\left[\frac{0.75}{1-0.75}\right]$$

$$t = \frac{1}{0.20}\left[\frac{0.75}{0.25}\right] \qquad t = \frac{1}{0.20} \times 3$$

$$\boxed{t = 15 \text{ min.}}$$ Ans.

For third order ⇒

$$\frac{X_A(2-X_A)}{(1-X_A)^2} = 2kC_{A0}^2\, t$$

$$2kC_{A0}^2 = \frac{1}{t}\left[\frac{X_A(2-X_A)}{(1-X_A)^2}\right]$$

$$2kC_{A0}^2 = \frac{1}{5}\left[\frac{0.50(2-0.50)}{(1-0.50)^2}\right]$$

$$2kC_{A0}^2 = \frac{1}{5}\left[\frac{0.75}{0.25}\right] = \frac{1}{5} \times 3 = 0.6$$

$$t = \frac{1}{2kC_{A0}^2}\left[\frac{X_A(2-X_A)}{(1-X_A)^2}\right]$$

$$\cancel{t = \frac{1}{2kC_{A0}^{-2}}} \qquad t = \frac{1}{0.6}\left[\frac{0.50(2-0.50)}{(1-0.50)^2}\right]$$

$$t = 1.67 \times 3$$

$$t = 5 \text{ minutes.}$$

Difference between Intergral method & differential method.

Integral method	Differential method.
1.) Integral method easy है।	1.) differential method easy नहीं
2.) ~~जब~~ इसका Use साधारण rate eq^n तथा expression को प्रदर्शित करने के लिए ~~कि~~ करते है।	2.) इसका Use Complicated rate eq^n तथा expression के analysis में करते है।
3.) इसके द्वारा Small data का Analysis किया जाता है।	3.) इसके द्वारा large amount ab data तथा accurate data का analysis किया जाता है।
4.) इसके द्वारा प्राप्त Rate eq^n की particular form को ज्ञात किया जाता है।	4.) इसके द्वारा Rate eq^n को develope किया जाता है।

Chapter = 4 Reactor Design

Kamal Rathor

Reactor ⇒ वह उपकरण जिसमें chemical Reaction कराई जाती है। Reactor कहलाता है।

chemical process ind. में जहाँ पर विभिन्न Unit Operation व Unit process की सहायता से अनेक प्रकार के उपयोगी पदार्थों का manufacture किया जाता है। वहाँ पर reactants को products में Convert करने के लिए विभिन्न प्रकार के reactor भी निश्चित स्थानों पर प्रयोग में लाये जाते हैं। chemical process Ind. में उपयोग में लाये जाने वाले reactor का वर्गीकरण 3 प्रकार से किया जाता है।

Types of Reactors

- Batch reactor
  - (i) Constant volume B. reactor
  - (ii) Variable volume Batch reactor
- Semi batch reactor
- Continuous Reactor
  - (i) Continuous stirred tank reactor (C.S.T.R.)
  - (ii) Plug flow reactor

Batch reactor ⇒ Batch reactor में एक खाली पात्र का use किया जाता है। जिसमें reactant को भर दिया जाता है और reaction start कर दिया जाता है। जैसे2 reaction आगे बढ़ती जाती है। वैसे2 reactant का कुछ भाग अभिक्रिया के द्वारा product में Convert हो जाता है। कुछ समय पश्चात product व Unconverted reactant को reactor से बाहर निकाल लिया जाता है।

ch. Ind. में उपयोग में लाये जाने batch reactor का वर्गीकरण 2 प्रकार से किया जाता है।

(i) Constant volume batch reactor
(ii) Variable Volume batch reactor

$A \rightarrow 2R$ reactant बढ़ने पर आयतन बढ़ जाता है।
$3A \rightarrow 2R$ reactant कम होने पर आयतन कम हो जाता है।

i) Constant volume batch reactor ⇒ वह batch reactor जिसका volume समय के साथ change नहीं होता है। उसे Constant Volume batch reactor कहा जाता है।

(ii) Variable Volume batch reactor ⇒ वह batch reactor जिसका volume समय के साथ change होता है। उसे Variable volume batch reactor कहा जाता है। किसी भी batch reactor में reactant का fractional Conversion time पर निर्भर करता है। तथा वे eqn जो किसी reactant के fractional Conversion और time में संबंध बताती है। वह batch reactor की design eqn कहलाती है।

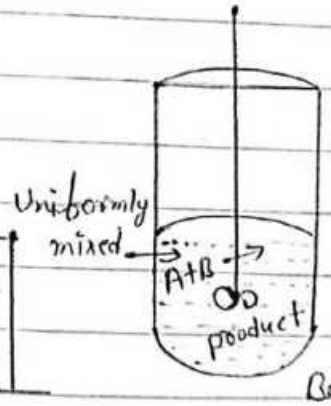
4.1 Design equation for Batch reactor :-

⇒ किसी भी Batch reactor में reactants को एक Container में भर दिया जाता है। तथा निश्चित समय के लिये रासायनिक अभिक्रिया कराई जाती है।

⇒ इस समयान्तराल में कोई भी reactant ना तो अन्दर डाला जाता है और ना ही product को exit किया जाता है। ~~Inp~~ $\boxed{\text{Inflow} = \text{outflow} = 0}$ —(1)

$$\boxed{\text{Input} = \text{Output}}$$

⇒ Batch reactor के लिये material balance :-
Reactant A के लिये -



Batch reacto

$$\boxed{\text{Inflow} = \text{outflow} + \text{disappearans by reaction} + \text{accumulation}} \quad \text{—— (2)}$$

for batach reactor
∵ Inflow = 0
outflow = 0

⇒ $0 = 0 +$ disappearans by reaction + accumulation

$\Rightarrow$ $\boxed{\text{Disappearans} = -\text{Accumulation}}$ — (3)

$$A + B \longrightarrow \text{product}$$

$\Rightarrow$ $$-r_A = k C_A C_B = -\frac{1}{V}\frac{dN_A}{dt}$$

$$V(-r_A) = \frac{dN_A}{dt}$$

$\because$ disappearance $= (-r_A)V$ — (4)

Accumulation $= -\frac{dN_A}{dt}$ — (5)

put the value of eqn (4) and (5) in (3)

$$(+r_A)V = +\frac{dN_A}{dt} \quad \text{— (6)}$$

$$\therefore X_A = \frac{N_{A0} - N_A}{N_{A0}}$$

$$N_{A0}X_A = N_{A0} - N_A$$

$$N_A = N_{A0}(1 - X_A) \quad \text{— (7)}$$

समी० (7) का मान समी० (6) में रखने पर

$$(-r_A)V = -\frac{d[N_{A0}(1-X_A)]}{dt}$$

$$\left\{\frac{d}{dt}(1) = 0\right.$$

$$(-r_A)V = \cancel{-d[N_{A0}]} + \left(+N_{A0}\frac{dX_A}{dt}\right)$$

$$(-r_A)V = N_{A0}\frac{dX_A}{dt}$$

$$dt = N_{A0}\frac{dX_A}{(-r_A)V}$$

Integrating the above eq^n with limit

$$\int_0^t dt = N_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dX_A}{(-r_A)V}$$

$$\boxed{t = N_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dX_A}{(-r_A)V}} \quad \text{——— (a)}$$

for constant volume reactor

$V = V_0$ is constant

$$t = \frac{N_{A0}}{V} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)}$$

$$t = \frac{N_{A0}}{V_0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} \qquad \left\{ \because \frac{N_{A0}}{V_0} = C_{A0} \right.$$

$$t = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A}$$

$$\boxed{t = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A}} \quad \text{——— (b)}$$

$$\cancel{t = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A}}$$

from eq^n (a)

$$t = N_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)V}$$

$\cancel{X_A} = 1 - C_A/C_{A0}$ $\quad C_A = C_{A0}(1 - X_A)$

$C_A = C_{A0} - C_{A0}X_A$

$dC_A = 0 - C_{A0}dX_A$

$dX_A = -\frac{1}{C_{A0}} dC_A$

$$t = N_{A0} \int_{C_{A0}}^{C_A} -\left(\frac{1}{C_{A0}}\right) \frac{dC_A}{(-r_A)V}$$

$V = V_0$

$$t = \frac{N_{A0}}{V_0} \times \frac{1}{C_{A0}} \int_{C_{A0}}^{C_A} -\frac{dC_A}{(-r_A)}$$

$$t = \cancel{C_{A0}} \times \frac{1}{\cancel{C_{A0}}} \int_{C_{A0}}^{C_A} -\frac{dC_A}{(-r_A)}$$

$$\boxed{t = -\int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{(-r_A)}} \quad \text{—— (b)}$$

$$\boxed{t = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} = -\int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{(-r_A)}}$$

यहाँ समी. (a) व (b) Design eq^n for Batch reactor कहलाती है।

other method for derive design eq^n for batch reactor

Inflow = outflow + disapperance by reaction + Accumulation

0 = 0 + disapperance by reaction + Accumulation

Disapperance = − Accumulation

$$A + B \longrightarrow \text{Product}$$

$$-r_A = K C_A C_B = \frac{1}{V} \frac{-dN_A}{dt}$$

$$\Rightarrow \underbrace{(-r_A) V}_{\text{disapperance}} = \underbrace{-\frac{dN_A}{dt}}_{\text{Accumulation}}$$

$$\Rightarrow dt = \frac{-\frac{dN_A}{V}}{(-r_A)} \qquad \frac{N_A}{V} = C_A$$

$$\Rightarrow dt = \frac{-dC_A}{(-r_A)} \quad \text{— (1)}$$

$$\because C_A = C_{A0}(1 - X_A) = \quad C_A = C_{A0} - C_{A0} X_A$$

$$\boxed{dC_A = 0 - C_{A0}\, dX_A} \quad \text{— (2)}$$

समी० (2) का मान समी० (1) में रखने पर

$$dt = \frac{C_{A0}\, dX_A}{(-r_A)} \Rightarrow \int_0^t dt = \int_0^{X_A} \frac{C_{A0}\, dX_A}{(-r_A)} \Rightarrow \boxed{t = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A}} \quad \text{— (3)}$$

from eq^n (1)

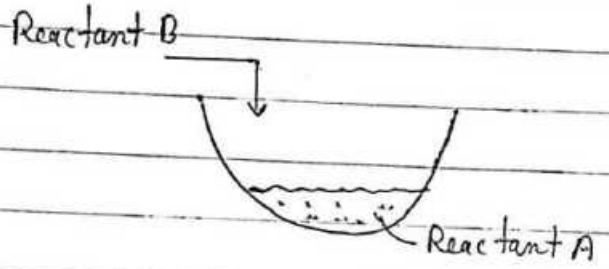
$$\boxed{t = -\int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{(-r_A)}} \quad \text{— (4)}$$

Note :- यहाँ पर eq^n (3) व (4) design eq^n for batch reactor कहलाती है

4.2 Semi batch reactor ⇒ Semi batch reactor है वह reactor है। जिसमें batch व Continuous reactor दोनों के लक्षण पाये जाते है। इस प्रकार के reactor में reaction mixture का volume तथा Composition अथवा दोनों समय के साथ परिवर्तित हो जाते है। ch. Industry में उपयोग में लाये जाने वाले Semi batch reactor को तीन भागों में बाँटा जाता है।

Type I Semi batch reactor
Type II Semi batch reactor
Type III Semi batch reactor

Type I Semi batch reactor ⇒

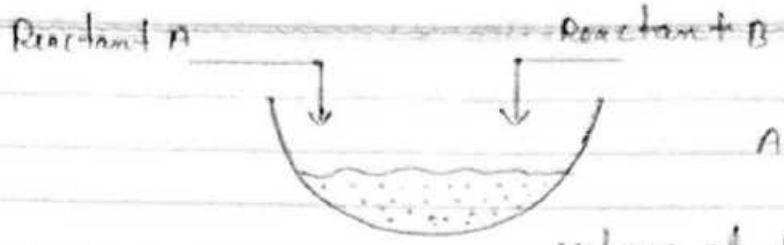


chemical reaction
$A + B \longrightarrow$ products

Volume and composition of reaction mixture change with time

यहाँ पर Ist Type Semi batch reactor दिखाया गया है। जिसका ch. Ind. में reactant को product में Convert करने के लिए किया जाता है। यहाँ पर chemical reaction $A + B \longrightarrow$ product को Convert किया जाता है। जो कि Semi batch reactor में हो रही है। इसमें एक खाली पात्र का use किया जाता है। इसमें reactant A को भर दिया जाता है। और reactant B को धीरे - धीरे मिलाया जाता है। इस प्रकार के Semi batch reactor में reaction mix. का volume व Composition समय के साथ change होते जाते है।

Type II Semi batch reactor ⇒ यहाँ पर IInd type Semi batch reactor दिखाया गया है। जिसका use ch. Ind. में reactant को product

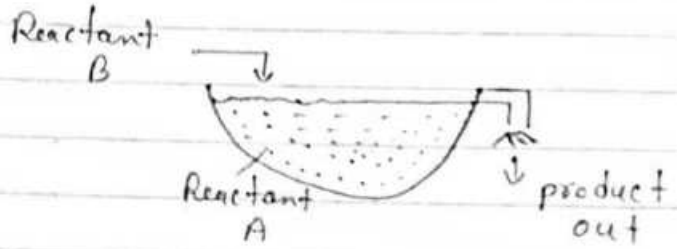


chemical reaction
$A+B \longrightarrow$ products

volume of the reaction mixture changes with time but Composition remains Unchanged.

में Convert करने के लिए किया जाता है। यहाँ पर $A+B \rightarrow$ products को Consider किया जाता है जो कि Semibatch reactor में हो रही है इस प्रकार के reactor में खाली पात्र का Use किया जाता है। जिसमें reactant A, B लगातार इसमें add किया जाता है। इस प्रकार के Semi batch reactor में reaction mixture का volume time के साथ change होता जाता है। लेकिन उसके Composition में time के साथ कोई change नहीं होता है।

Type III Semi batch reactor ⇒



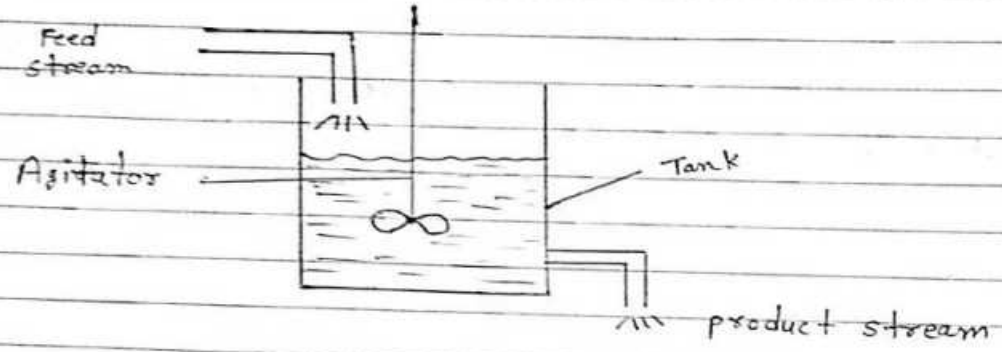
chemical reaction
$A+B \longrightarrow$ products

Composition of reaction mix. changes with time But volume of the reaction mix. remains Unchanged

यहाँ पर एक IIIrd Type का Semi batch reactor दिखाया गया है। जिसका Use ch. Ind. में reactant को product में Convert करने के लिए किया जाता है। यहाँ पर एक chemical reaction $A+B \rightarrow$ product को Consider किया जाता है। जो कि Semi batch reactor में हो रही है। इस प्रकार के reactor में एक खाली पात्र का Use किया जाता है। जिसमें reactant A को भर दिया जाता है। और reactant B को धीरे - धीरे इसमें मिलाया जाता है। तथा reaction से जो product प्राप्त होता है। उसे भी लगातार

reactor से बाहर निकाला जाता है। इस प्रकार के Semibatch reactor में reaction mix. का संगठन (composition) time के साथ change होता है। लेकिन उसके volume में कोई परिवर्तन नहीं आता है।

4.3 Continuous stirred tank Reactor or Mixed flow reactor (C.S.T.R.) ⇒



यहाँ पर एक C.S.T.R. दिखाया गया है। जिसका Use chemical industries में reactant को product में Convert करने के लिए किया जाता है। इसमें धातु के बने हुए एक cylindrical vessel का use किया जाता है। जिसे vertical position में व्यवस्थित किया जाता है। इसका dia. 1-2 meter व ऊँचाई 3-4 meter के बीच रखी जाती है। इसके ऊपरी सिरे पर एक Inlet pipe लगाया जाता है। जिसकी सहायता से reactant को reactor में enter कराया जाता है। reaction mixture को Continuosly mix करने के लिए एक agitator का प्रयोग किया जाता है। जब reactant reactor में enter करते हैं तो ch. reaction के द्वारा reactant का कुछ भाग product में Convert हो जाता है। इसके निचले सिरे पर एक outletpipe लगाया जाता है। जिसकी सहायता से product व Unconverted reactant को reactor से बाहर निकाल लिया जाता है। यहाँ पर reactant का fractional Conversion व reactant के volume पर निर्भर करता है तथा वे eqn जो किसी भी reactant के fractional Conversion और reactor के volume में संबंध बताती है। वे C.S.T.R. की design eqn कहलाती है। इस

का मान निम्न प्रकार से ज्ञात किया जाता है।
तथा इसमें Composition प्रत्येक बिन्दु पर एक समान होती है।

Design eq^n for C.S.T.R. ⇒

F_{A0} = molar flow rate of reactant A in feed stream
C_{A0} = Con^c of reactant A in feed stream
F_A = molar flow rate of reactant A in product stream
C_{Af} = Con^c of reactant A in product stream
$-r_A$ = Rate of chemical reaction of reactant A
V_0 = Volumetric flow rate of feed stream
V_f = Volumetric flow rate of product stream
V = volume of the C.S.T.R.

Input = output + accumulation + Rate of disappearance − formation

∵ यह एक Ideal reactor है, इसलिये :-

accumulation = 0 , formation = 0

∴ Input = output + Rate of disappearance.

या

moles of A in − moles of A out = moles of A Reacted

~~$F_{A0} - F_A = (-r_A)V$~~ A का Input = F_{A0}

A का output = $X_A = \dfrac{F_{A0} - F_A}{F_{A0}}$

$= F_{A0} - F_A = F_{A0}X_A$

$= F_A = F_{A0}(1 - X_A)$ — ①

rate of disappearance = $-(r_A)V$

⇒ $F_{A0} = F_A + (-r_A)V$ from eq^n ①

$F_{A0} = F_{A0}(1 - X_A) + (-r_A)V$

$$\frac{\tau}{C_{A0}} = \frac{X_A}{(-r_A)}$$

$\Rightarrow \cancel{F_{A0}} = \cancel{F_{A0}} - F_{A0}X_A + (-r_A)V$

$\Rightarrow F_{A0}X_A = (-r_A)V$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{V}{F_{A0}} = \frac{X_A}{(-r_A)}} \quad \text{— (a)}$$

$\Rightarrow C_{A0}$ से गुणा करने पर

$$\Rightarrow \frac{C_{A0}V}{F_{A0}} = \frac{C_{A0}X_A}{(-r_A)} \qquad \left\{ \tau = \frac{C_{A0} \cdot X_A}{F_{A0}} \right.$$

$$\Rightarrow \tau = \frac{C_{A0}X_A}{(-r_A)}$$

$\because C_A = C_{A0}(1 - X_A)$

$C_A = C_{A0} - C_{A0}X_A \Rightarrow C_{A0}X_A = C_{A0} - C_A$

$$\boxed{\tau = \frac{C_{A0} - C_A}{(-r_A)}} \quad \text{— (b)}$$

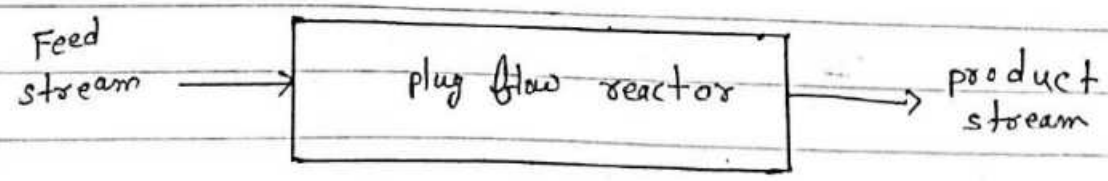
ε_A के किसी भी value के लिए applicable है।

So $\Rightarrow$

$$\boxed{\frac{\tau}{C_{A0}} = \frac{V}{F_{A0}} = \frac{X_A}{(-r_A)} = \frac{\Delta X_A}{-r_A}} \quad \text{— (c)}$$

सभी (a), (b) व (c) C.S.T.R. के लिए design eqn कहलाती है।

4.4 Plug flow reactor $\Rightarrow$

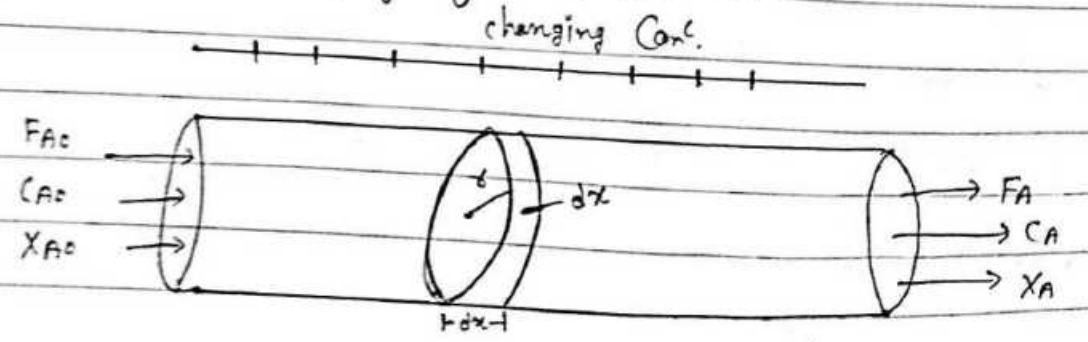


यहाँ पर एक plug flow reactor दिखाया गया है। जिसका use ch. Industries में reactant को product में Convert करने के लिए किया जाता है। इसमें एक धातु के बने हुये Cylindrical vessel का प्रयोग Use किया जाता है। जिसे horizontal / vertical position में व्यवस्थित किया जाता है। इसका दिः. 1-2 meter व लंबाई 3-4 मीटर के बीच रखी जाती है। इसके बाँये सिरे पर एक Inlet pipe लगाया जाता है। जिसकी सहायता से reactant को Reactor में enter कराया जाता है। जब reactant reactor में enter करते हैं। तो ch. reaction के द्वारा reactant का कुछ भाग product में Convert हो जाता है। तथा इसके दाँये सिरे पर एक outlet pipe लगाया जाता है। जिसकी सहायता से product व Unconverted reactant को Continuosly reactor से बाहर निकाल लिया जाता है। किसी भी plug flow reactor में ~~reactor में~~ reactant का fractional Conversion reactor के volume पर निर्भर करता है। तथा वे eqn जो किसी भी reactant के fractional Conversion (X_A) व reactor के volume (V) में संबंध बताती है। वह design eqn कहलाती है। इसका मान निम्न प्रकार से ज्ञात किया जाता है। इस प्रकार के reactor को tubler reactor भी कहते हैं।

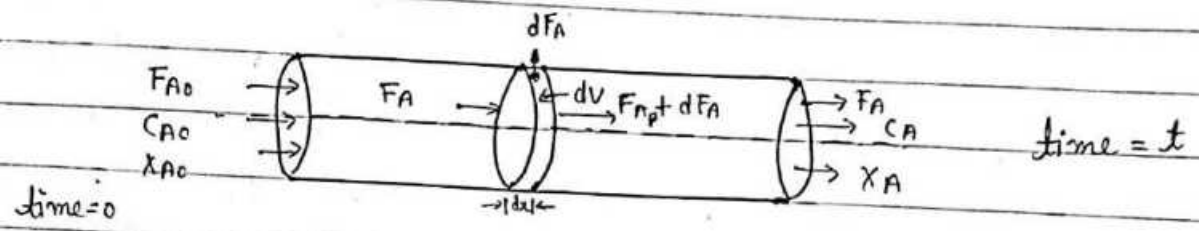
=> यह एक प्रकार का Continuous flow reactor है जिसमें किसी भी प्रकार की mixing नहीं होती है।

=> अर्थात् प्रत्येक बिन्दु पर PFR में सान्द्रता अलग² होगी। PFR में reactant की Composition का मान reactor की लम्बाई के सापेक्ष परिवर्तित होता है।

=> Design eqn for plug flow reactor =>



F_{A0} = molar flow rate of Reactant A in feed stream
C_{A0} = Conc of reactant A in feed stream
v_0 = volumetric flow rate of feed stream
C_{Af} = Conc of reactant A in product stream
F_A = molar flow rate of reactant A in product stream
V = Volume of the PFR
v_f = volumetric flow rate of product stream



Input = output + accumulation + rate of disappearance − formation — (1)

⇒ यह एक Ideal reactor है।

∴ Accumulation = 0 , formation = 0

Input = F_{A0}

output ⇒ $F_A = F_{A0} + dF_A$

disappearance of reaction = $(-r_A)\,dV$

निम्न प्राप्त value को समी (1) में put करने पर -

$$\cancel{F_{A0}} = \cancel{F_{A0}} + dF_A + (-r_A)\,dV$$

$$\Rightarrow -dF_A = (-r_A)\,dV \quad \text{— (2)}$$

समी. (2) से

$$\therefore F_A = F_{A0}(1 - X_A) \Rightarrow \cancel{dF_A} = \cancel{-F_{A0}\,dX_A}$$

अवकलन करने पर

$$\frac{dF_A}{\cancel{dt}} = \frac{dF_{A0}}{\cancel{dt}} - \frac{dF_{A0}\,dX_A}{\cancel{dt}}$$

$$dF_A = 0 - dF_{A0}\, dX_A$$

$$dF_A = -\, dF_{A0}\, dX_A \quad \text{—— (3)}$$

समी. (3) से समी. (2) में put करने पर

$$\cancel{-dF_{A0}\, X_A} \quad -dF_A = (-r_A)\, dV$$

$$\cancel{dF_{A0}\, dX_A}$$

$$dF_{A0}\, dX_A = (-r_A)\, dV$$

$$F_{A0} \cdot dX_A = (-r_A)\, dV$$

$$\frac{dV}{F_{A0}} = \frac{dX_A}{(-r_A)} \quad \text{—— (4)}$$

समी. (4) का समाकलन करने पर

$$\int_0^V \frac{dV}{F_{A0}} = \int_0^{X_{AF}} \frac{dX_A}{-r_A}$$

$$\frac{1}{F_{A0}} \int_0^V dV = \int_0^{X_{AF}} \frac{dX_A}{-r_A}$$

$$\frac{1}{F_{A0}} [V]_0^V = \int_0^{X_{AF}} \frac{dX_A}{-r_A}$$

$$\frac{V}{F_{A0}} = \int_0^{X_{AF}} \frac{dX_A}{-r_A}$$

$$\tau = \frac{V}{V_0} = \text{from space time}$$

⇒ C_{A0} से गुणा करने पर

$$\frac{V}{F_{A0}} \times C_{A0} = C_{A0} \int_0^{X_{AF}} \frac{dX_A}{(-r_A)}$$

$$\boxed{\tau = \frac{V}{V_0} = \frac{C_{A0} V}{F_{A0}} = C_{A0} \int^{X_{AF}} \frac{dX_A}{(-r_A)}} \quad \text{—— (5)}$$

design eqn for PFR

~~4.7~~ ~~Space time (τ)~~ ⇒

$$\tau = \frac{V}{V_0} = C_{A0} \int_0^{X_{Af}} \frac{dX_A}{(-r_A)}$$

$$X_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}$$

$$dX_A = -\frac{1}{C_{A0}} dC_A$$

$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{\tau}{C_{A0}} = \int_{X_{Ai}}^{X_{AF}} \frac{dX_A}{(-r_A)}$$

$$X_A C_{A0} = C_{A0} - C_A$$

$$C_A = X_A C_{A0} - C_{A0}$$

$$C_A = C_{A0}(1 - X_A)$$

$$C_A = C_{A0} - C_{A0} X_A$$

$$dC_A = 0 - C_{A0} dX_A$$

$$dX_A = \frac{1}{-C_{A0}} dC_A$$

$$\tau = -\int_{C_{A0}}^{C_{Af}} \frac{dC_A}{(-r_A)}$$

$$\tau = \frac{V}{V_0} = C_{A0} \int_0^{X_{Af}} \frac{dX_A}{(-r_A)}$$

$$\boxed{\tau = -\int_{C_{A0}}^{C_{Af}} \frac{dC_A}{-r_A}} \text{ — (b) for any } \varepsilon_A$$

समी. (a) व (b) PFR के लिए design eqn है।

4.7 Space time (τ) ⇒ किसी भी निश्चित feed Condition पर feed के एक reactor volume को process करने में जितने समय की आवश्यकता होती है। उसे Space time (τ) कहा जाता है।

$$\boxed{\tau = \frac{V}{V_0}} = \frac{\text{Volume of reactor}}{\text{Volumetric flow rate}}$$

$$V_0 = \frac{F_{A0}}{C_{A0}}$$

V = volume of reactor
V_0 = Volumetric flow rate

$$C = \frac{n}{V}$$
$$V = n/C$$
n = of moles
$$V_0 = \frac{F_{A0}}{C_{A0}}$$

$$\tau = \frac{V}{F_{A0}/C_{A0}}$$

$$\tau = \frac{V C_{A0}}{F_{A0}} = \frac{V}{V_0}$$

$$\boxed{\frac{\tau}{C_{A0}} = \frac{V}{F_{A0}}}$$

Q.8 Space Velocity ⇒ किसी भी निश्चित feed Condition पर 1 sec. में feed के जितने reactor volume को process किया जाता है। उसे Space Velocity (S) कहा जाता है।

Space Velocity, Space time के inversly proportional है।

$$S = \frac{1}{\text{Space time}}$$

$$\tau = \frac{1}{S} = \frac{C_{A0} V}{F_{A0}} = \tau C_{A0}$$

$$= \frac{1}{S} C_{A0}$$

$$S = \frac{1}{\tau} \qquad \frac{1}{V/V_0}$$

$$S = 1 \Big/ \frac{V C_{A0}}{F_{A0}}$$

$$\text{Space velocity } (S) = \frac{F_{A0}}{V \cdot C_{A0}} = \frac{1}{\tau}$$

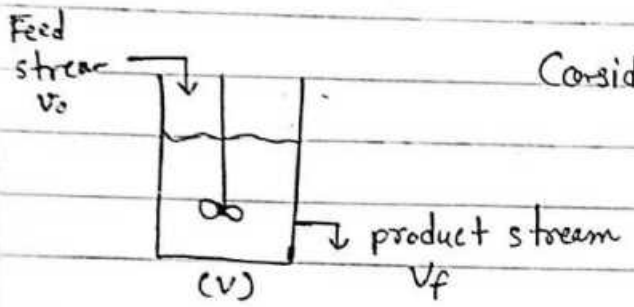
unit $\frac{1}{\text{sec}}$

$$\frac{\tau}{V C_{A0}} = \frac{1}{F_{A0}}$$

$$\boxed{\frac{\tau}{C_{A0}} = \frac{V}{F_{A0}}}$$

4.9 ⇒ Holding time ⇒ किसी भी Continuous reactor में reactant के molecules जितने समय के लिए reactor में उप० करते है। उसे holding time कहा जाता है। अर्थात reactant के molecules के reactor में enter व बाहर निकलने के मध्य जो समय अन्तराल लगता है। उसे holding time कहा जाता है।

eq^n for holding time in A Continuous stirred tank reactor ⇒



Consider A ch. reaction $aA \rightarrow rR$ taking place in A

V = Volume of the C.S.T.R.
v_0 = Volumetric flow rate of feed stream
v_f = Volumetric flow rate of product stream
X_A = Fractional conversion of reactant A
ε_A = Expansion factor $\frac{r-a}{a}$
$\bar{t}_m$ = holding time in C.S.T.R.

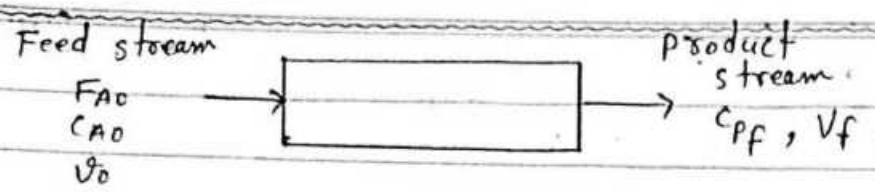
$$\bar{t}_m = \frac{V}{v_f}$$

$$v_f = v_0(1+\varepsilon_A X_A)$$

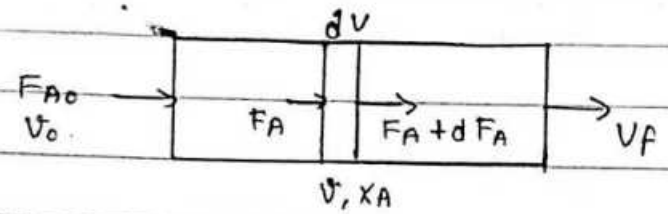
$$\boxed{\bar{t}_m = \frac{V}{v_0(1+\varepsilon_A X_A)}}$$

eq^n for holding time in A C.S.T.R.

eq^n for holding time in A plug flow reactor ⇒



Consider A chemical reaction $aA \rightarrow rR$ taking place in A PFR



Consider material balance of Reactant A over A differential Volume dV

k = Rate Constant
n = order of the chemical reaction
$-r_A$ = Rate of chemical reaction of Reactant A
τ_p = holding time in PFR

moles of A, in − moles of out = moles of A reactant

$$\cancel{F_A} - (\cancel{F_A} + dF_A) = (-r_A)\,dV$$

$$-dF_A = (-r_A)\,dV \quad \text{— i)}$$

fractional conversion of reactant A

$$X_A = \frac{F_{A0} - F_A}{F_{A0}}, \quad F_{A0} - F_A = F_{A0} X_A, \Rightarrow F_A = F_{A0}(1 - X_A) \text{ — ii)}$$

समी. (ii) का अवकलन करने पर $dF_A = -F_{A0}\,dX_A$ — (iii)

$$F_{A0}\,dX_A = (-r_A)\,dV$$

$$dV = \left(\frac{F_{A0}\,dX_A}{(-r_A)}\right)$$

$$-r_A = k C_A^n$$

$$C_A = \frac{C_{A0}(1 - X_A)}{(1 + \varepsilon_A X_A)}$$

$F_{A0} = C_{A0} v_0$, $F_A = C_A v$

$$F_A = F_{A0}(1 - X_A) \Rightarrow C_A v_0 (1 + \varepsilon_A X_A)$$

$$C_A \cancel{v_0} (1 - X_A) = C_A \cancel{v_0} (1 + \varepsilon_A X_A)$$

$$C_A = \frac{C_{A0}(1 - X_A)}{(1 + \varepsilon_A X_A)}$$

$$-r_A = \frac{k C_{A0}^{n} (1 - X_A)^n}{(1 + \varepsilon_A X_A)^n}$$

$$dV = \left(\frac{F_{A0} (1 + \varepsilon_A X_A)^n}{k C_{A0}^{n} (1 - X_A)^n} \right) dX_A$$

dt = Time taken by the molecules of reactants in passing through differential volume (dV)

$$dt = \frac{dV}{v}$$

$$v = v_0 (1 + \varepsilon_A X_A)$$

$$dt = \frac{F_{A0} (1 + \varepsilon_A X_A)^n}{k C_{A0}^{n} (1 - X_A)^n v_0 (1 + \varepsilon_A X_A)} dX_A$$

$$dt = \frac{C_{A0} \cancel{v_0} (1 + \varepsilon_A X_A)^n}{k C_{A0}^{n} (1 - X_A)^n \cancel{v_0} (1 + \varepsilon_A X_A)} dX_A$$

$$dt = \frac{C_{A0} v_0 (1 + \varepsilon_A X_A)^{n-1}}{k C_{A0}^{n-1} (1 - X_A)^n} dX_A$$

$\bar{t}_p$ = total time taken by the molecules of reactant in passing through total volume V

$$\bar{t}_p = \int dt$$

$$\bar{t}_p = \int_0^{X_A} \frac{(1 + \varepsilon_A X_A)^{n-1}}{k C_{A0}^{n-1} (1 - X_A)^n} dX_A$$

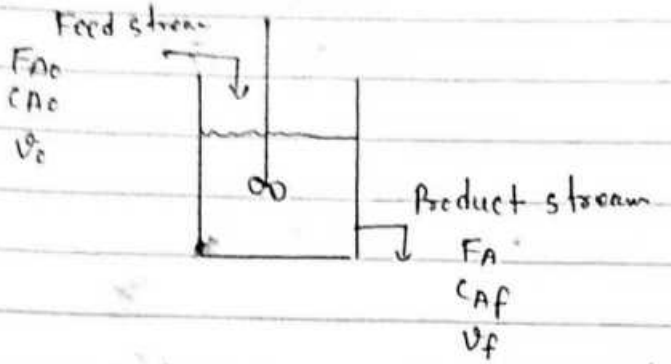
$$\boxed{\bar{t}_p = \frac{1}{k C_{A0}^{n-1}} \int_0^{X_A} \frac{(1 + \varepsilon_A X_A)^{n-1}}{(1 - X_A)^n} dX_A}$$

eqn for holding time in A plug flow reactor

Conc x velocity का ग्रुप
= molar flow rate

R.K.S.

design eqn for C.S.T.R. →



Consider A chemical reaction. $aA \rightarrow rR$ taking place in A C.S.T.R

F_{A0} = molar flow rate of reactant A in feed

C_{A0} = Conc of reactant A in feed stream

v_0 = Volumetric flow rate of feed stream

F_A = molar flow rate of reactant A in product stream

C_{Af} = Conc of reactant A in product stream

V = Volume of the C.S.T.R.

X_A = fractional Conversion of reactant A

ε_A = Expansion factor $= \frac{r-a}{a}$

k = Rate Constant

Consider material balance of Reactant A

moles of A in − moles of A out = moles of A Reacted

$$F_{A0} - F_A = (-r_A)V \quad \text{—(i)}$$

fractional conversion of Reactant A

$$X_A = \frac{F_{A0} - F_A}{F_{A0}} \qquad F_{A0} - F_A = F_{A0} X_A \quad \text{—(ii)}$$

$$F_{A0} X_A = (-r_A) V \quad \text{—(iii)}$$

$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{X_A}{(-r_A)} \quad \text{—(iv)}$$

$$F_{A0} = C_{A0} v_0$$

$$-r_A = kC_{Af}^{n}$$

$$F_{A0} = C_{A0} v_0$$

$$F_A = C_{Af} v_f$$

$$v_f = v_0 (1 + \varepsilon_A X_A)$$

$$F_A = F_{A0} (1 - X_A) \quad \text{— समी. (ii) से}$$

$$F_{A0} (1 - X_A) = C_{Af} v_0 (1 + \varepsilon_A X_A)$$

$$C_{A0} v_0 (1 - X_A) = C_{Af} v_0 (1 + \varepsilon_A X_A)$$

$$C_{Af} = \frac{C_{A0} (1 - X_A)}{(1 + \varepsilon_A X_A)} \quad \text{— (v)}$$

समी. (v) का मान $-r_A = kC_{Af}^{n}$ में रखने पर

$$-r_A = \frac{kC_{A0}^{n} (1 - X_A)^{n}}{(1 + \varepsilon_A X_A)^{n}}$$

समी. (iv) से :-

$$\frac{V}{C_{A0} v_0} = \frac{X_A (1 + \varepsilon_A X_A)^{n}}{kC_{A0}^{n} (1 - X_A)^{n}}$$

$$\frac{V}{v_0} = \frac{X_A (1 + \varepsilon_A X_A)^{n}}{kC_{A0}^{n-1} (1 - X_A)^{n}}$$

$$\frac{V}{v_0} = \tau = \text{Space time}$$

$$\tau = \frac{X_A (1 + \varepsilon_A X_A)^{n}}{kC_{A0}^{n-1} (1 - X_A)^{n}}$$

$$\boxed{kC_{A0}^{n-1} \tau = \frac{X_A (1 + \varepsilon_A X_A)^{n}}{(1 - X_A)^{n}}}$$

Design eqn for nth order chemical reaction taking place in A C.S.T.R.

for zero order $n = 0$

$$k C_{A0}^{-1} \tau = \frac{X_A (1 + \varepsilon_A X_A)^0}{(1 - X_A)^0}$$

$$k C_{A0}^{-1} \tau = X_A$$

$$\boxed{k\tau = C_{A0} X_A}$$ Rate expression for zero order

for first order $n = 1$

$$k C_{A0}^{1-1} \tau = \frac{X_A (1 + \varepsilon_A X_A)^1}{(1 - X_A)^1}$$

$$\boxed{k\tau = \frac{X_A (1 + \varepsilon_A X_A)}{(1 - X_A)}}$$

for second order $n = 2$

$$k C_{A0}^{2-1} \tau = \frac{X_A (1 + \varepsilon_A X_A)^2}{(1 - X_A)^2}$$

$$\boxed{k C_{A0} \tau = \frac{X_A (1 + \varepsilon_A X_A)^2}{(1 - X_A)^2}}$$

for third order $n = 3$

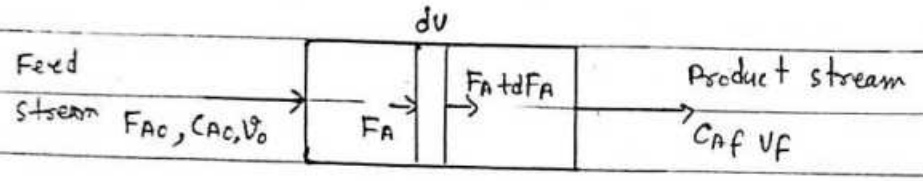
$$k C_{A0}^{3-1} \tau = \frac{X_A (1 + \varepsilon_A X_A)^3}{(1 - X_A)^3}$$

$$\boxed{k C_{A0}^{2} \tau = \frac{X_A (1 + \varepsilon_A X_A)^3}{(1 - X_A)^3}}$$

design eqn for plug flow reactor by R.K.S. ⇒

Consider A ch. reaction $aA \rightarrow rR$ taking place in A plug flow reactor

F_{A0} = molar flow rate of reactant A in feed stream
C_{A0} = Conc of reactant A in feed stream
C_{Af} = Conc of reactant A in product stream
$\dot{V}_f$ = Volumetric flow rate of product stream
V = Volume of the PFR
ε_A = Expansion factor = $\frac{r-a}{a}$



Consider material balance of reactant A over A differential Volume dV

moles of A in − moles of A out = moles of A reacted

$$\cancel{F_A} - (\cancel{F_A} + dF_A) = (-r_A)\,dV$$

$$-dF_A = (-r_A)\,dV \quad \text{— (i)}$$

fraction conversion of reactant A

$$X_A = \frac{F_{A0} - F_A}{F_{A0}}$$

$$F_{A0} X_A = F_{A0} - F_A$$

$$F_A = F_{A0} - F_{A0} X_A$$

$$F_A = F_{A0}(1 - X_A)$$

$$dF_A = -F_{A0}\,dX_A \quad \text{— (ii)}$$

समी. (i) में मान रखने पर

$$F_{A0}\,dX_A = (-r_A)\,dV$$

$$\int_0^V dV = \int_0^{X_A} \frac{F_{A0}\, dX_A}{(-r_A)}$$

$$V = F_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A}$$

$$-r_A = kC_A^n \qquad \left\{ \because \; C_A = \frac{C_{A0}(1-X_A)}{(1+\varepsilon_A X_A)} \right.$$

$$-r_A = \frac{kC_{A0}^n (1-X_A)^n}{(1+\varepsilon_A X_A)^n}$$

$$\frac{V}{F_{A0}} = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A}$$

$$\frac{V}{C_{A0} v_0} = \int_0^{X_A} \frac{(1+\varepsilon_A X_A)^n}{kC_{A0}^n (1-X_A)^n}\, dX_A$$

$$\frac{V}{C_{A0} v_0} = \frac{1}{kC_{A0}^n} \int_0^{X_A} \frac{(1+\varepsilon_A X_A)^n}{(1-X_A)^n}\, dX_A$$

$$\frac{V}{v_0} = \frac{1}{kC_{A0}^{n-1}} \int_0^{X_A} \frac{(1+\varepsilon_A X_A)^n}{(1-X_A)^n}\, dX_A$$

$$\tau = \frac{1}{kC_{A0}^{n-1}} \int_0^{X_A} \frac{(1+\varepsilon_A X_A)^n}{(1-X_A)^n}\, dX_A$$

$$\boxed{kC_{A0}^{n-1}\tau = \int_0^{X_A} \frac{(1+\varepsilon_A X_A)^n}{(1-X_A)^n}\, dX_A}$$

design eqn for n^{th} order ch. reaction taking place in a plug flow reactor

$$\int \frac{dX_A}{(1-X_A)^2} = (-1)\int \frac{(-1)(1-X_A)^{-2+1}}{-2+1}$$

$$= +1 \int + \frac{1}{1-X_A}$$

$$k\tau = (1+\varepsilon_A)\int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1-X_A)} - \varepsilon_A \int_0^{X_A} dX_A$$

$$k\tau = -(1+\varepsilon_A)\left[\ln(1-X_A)\right]_0^{X_A} - \varepsilon_A \left[X_A\right]_0^{X_A}$$

$$k\tau = -(1+\varepsilon_A)\left[\ln(1-X_A) - \ln 1\right] - \varepsilon_A\left[X_A - 0\right]$$

$$\boxed{k\tau = -(1+\varepsilon_A)\ln(1-X_A) - \varepsilon_A X_A}$$

For Second order chr reaction $n=2$

$$kC_{A0}\tau = \int_0^{X_A} \frac{(1+\varepsilon_A X_A)^2}{(1-X_A)^2}\, dX_A$$

on adding and Substracting ε_A

$$kC_{A0}\tau = \int_0^{X_A} \frac{(1+\varepsilon_A - \varepsilon_A + \varepsilon_A X_A)^2}{(1-X_A)^2}\, dX_A$$

$$kC_{A0}\tau = \int_0^{X_A} \frac{\left[(1+\varepsilon_A) - \varepsilon_A(1-X_A)\right]^2}{(1-X_A)^2}\, dX_A$$

$$kC_{A0}\tau = \int_0^{X_A} \frac{(1+\varepsilon_A)^2 - 2\varepsilon_A(1+\varepsilon_A)(1-X_A) + \varepsilon_A^2(1-X_A)^2}{(1-X_A)^2}\, dX_A$$

$$kC_{A0}\tau = (1+\varepsilon_A)^2\int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1-X_A)^2} - 2\varepsilon_A(1+\varepsilon_A)\int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1-X_A)} + \varepsilon_A^2\int_0^{X_A} dX_A$$

$$kC_{A0}\tau = (1+\varepsilon_A)^2\left[\frac{1}{1-X_A}\right]_0^{X_A} + 2\varepsilon_A(1+\varepsilon_A)\left[\ln(1-X_A)\right]_0^{X_A} + \varepsilon_A^2\left[X_A\right]_0^{X_A}.$$

$$\int \frac{dX_A}{(1-X_A)^2} = (-1)\int \frac{(1-X_A)^{-2+1}}{-2+1}$$

$$= +1 \int + \frac{1}{1-X_A}$$

$$k\tau = (1+\varepsilon_A)\int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1-X_A)} - \varepsilon_A \int_0^{X_A} dX_A$$

$$k\tau = -(1+\varepsilon_A)\left[\ln(1-X_A)\right]_0^{X_A} - \varepsilon_A\left[X_A\right]_0^{X_A}$$

$$k\tau = -(1+\varepsilon_A)\left[\ln(1-X_A) - \ln 1\right] - \varepsilon_A\left[X_A - 0\right]$$

$$\boxed{k\tau = -(1+\varepsilon_A)\ln(1-X_A) - \varepsilon_A X_A}$$

For Second order ch. reaction $n=2$

$$kC_{A0}\tau = \int_0^{X_A} \frac{(1+\varepsilon_A X_A)^2}{(1-X_A)^2}\, dX_A$$

on adding and Substracting ε_A

$$kC_{A0}\tau = \int_0^{X_A} \frac{(1+\varepsilon_A - \varepsilon_A + \varepsilon_A X_A)^2}{(1-X_A)^2}\, dX_A$$

$$kC_{A0}\tau = \int_0^{X_A} \frac{\left[(1+\varepsilon_A) - \varepsilon_A(1-X_A)\right]^2}{(1-X_A)^2}\, dX_A$$

$$kC_{A0}\tau = \int_0^{X_A} \frac{(1+\varepsilon_A)^2 - 2\varepsilon_A(1+\varepsilon_A)(1-X_A) + \varepsilon_A^2(1-X_A)^2}{(1-X_A)^2}\, dX_A$$

$$kC_{A0}\tau = (1+\varepsilon_A)^2\int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1-X_A)^2} - 2\varepsilon_A(1+\varepsilon_A)\int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1-X_A)} + \varepsilon_A^2\int_0^{X_A} dX_A$$

$$kC_{A0}\tau = (1+\varepsilon_A)^2\left[\frac{1}{1-X_A}\right]_0^{X_A} + 2\varepsilon_A(1+\varepsilon_A)\left[\ln(1-X_A)\right]_0^{X_A} + \varepsilon_A^2\left[X_A\right]_0^{X_A}$$

$$(a-b)^3 = a^3 - 3a^2b + 3ab^2 - b^3$$

$$kC_{A_0}\tau = (1+\xi_A)^2\left[\frac{1}{1-X_A} - 1\right] + 2\xi_A(1+\xi_A)\left[\ln(1-X_A) - \ln 1\right] + \xi_A^2\left[X_A - 0\right]$$

$$kC_{A_0}\tau = (1+\xi_A)^2\left[\frac{1-1+X_A}{1-X_A}\right] + 2\xi_A(1+\xi_A)\ln(1-X_A) + \xi_A^2 X_A$$

$$\boxed{kC_{A_0}\tau = (1+\xi_A)^2\left[\frac{X_A}{1-X_A}\right] + 2\xi_A(1+\xi_A)\ln(1-X_A) + \xi_A^2 X_A}$$

For third order $n=3$

$$kC_{A_0}^2\tau = \int_0^{X_A} \frac{(1+\xi_A X_A)^3}{(1-X_A)^3}\,dX_A$$

on adding and Substracting ξ_A

$$kC_{A_0}^2\tau = \int_0^{X_A} \frac{(1+\xi_A - \xi_A + \xi_A X_A)^3}{(1-X_A)^3}\,dX_A$$

$$\cancel{kC_{A_0}^2\tau = \int_0^{X_A} \frac{(1+\xi_A)^3 - 3\xi_A + \xi_A X_A)^3}{(1-X_A)^3}\,d}$$

$$kC_{A_0}^2\tau = \int_0^{X_A} \frac{(1+\xi_A)^3 - 3\xi_A(1+\xi_A)^2(1-X_A) + 3\xi_A^2(1+\xi_A)(1-X_A)^2 - \xi_A^3(1-X_A)^3}{(1-X_A)^3}\,d$$

$$kC_{A_0}^2\tau = (1+\xi_A)^3\int_0^{X_A}\frac{dX_A}{(1-X_A)^3} - 3\xi_A(1+\xi_A)^2\int_0^{X_A}\frac{dX_A}{(1-X_A)^2} + 3\xi_A^2(1+\xi_A)\int_0^{X_A}\frac{dX_A}{1-X_A} - \xi_A^3\int_0^{X_A} dX_A$$

$$kC_{A_0}^2\tau = (1+\varepsilon_A)^3\left\{\frac{1}{2(1-X_A)^2}\right\}_0^{X_A} - 3\varepsilon_A(1+\varepsilon_A)^2\left\{\frac{1}{1-X_A}\right\}_0^{X_A} + 3\varepsilon_A^2(1+\varepsilon_A)\left\{-\ln(1-X_A)\right\}_0^{X_A}$$

$$- \varepsilon_A^3\{X_A\}_0^{X_A}$$

$$kC_{A_0}^2\tau = \frac{(1+\varepsilon_A)^3}{2}\left\{\frac{1}{(1-X_A)^2} - 1\right\} - 3\varepsilon_A(1+\varepsilon_A)^2\left\{\frac{1}{1-X_A} - 1\right\} - 3\varepsilon_A^2(1+\varepsilon_A)$$

$$\left\{\ln(1-X_A) - \ln 1\right\} - \varepsilon_A^3\{X_A - 0\}$$

$$kC_{A_0}^2\tau = \frac{(1+\varepsilon_A)^3}{2}\left\{\frac{1-(1-X_A)^2}{(1-X_A)^2}\right\} - 3\varepsilon_A(1+\varepsilon_A)^2\left\{\frac{1-1+X_A}{1-X_A}\right\} - 3\varepsilon_A^2(1+\varepsilon_A)$$

$$\ln(1-X_A) - \varepsilon_A^3 X_A$$

$$kC_{A_0}^2\tau = \frac{(1+\varepsilon_A)^3}{2}\left\{\frac{1-(1-2X_A+X_A^2)}{(1-X_A)^2}\right\} - 3\varepsilon_A(1+\varepsilon_A)^2\left\{\frac{X_A}{1-X_A}\right\} - 3\varepsilon_A^2$$

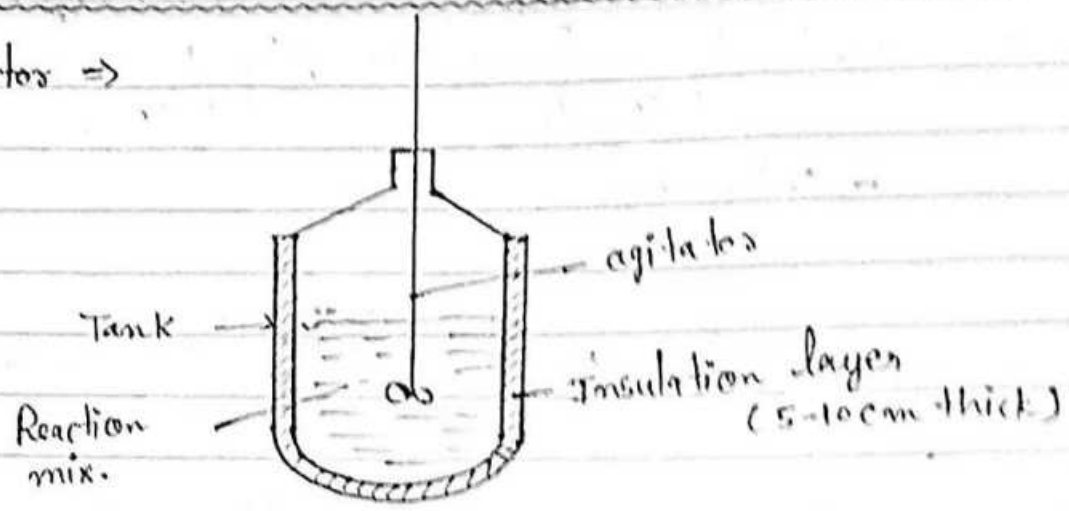
$$(1+\varepsilon_A)\ln(1-X_A) - \varepsilon_A^3 X_A$$

$$kC_{A_0}^2\tau = \left(\frac{1+\varepsilon_A}{2}\right)^3\left\{\frac{2X_A - X_A^2}{(1-X_A)^2}\right\} - 3\varepsilon_A(1+\varepsilon_A)^2\left\{\frac{X_A}{1-X_A}\right\} - 3\varepsilon_A^2(1+\varepsilon_A)$$

$$\ln(1-X_A) - \varepsilon_A^3 X_A$$

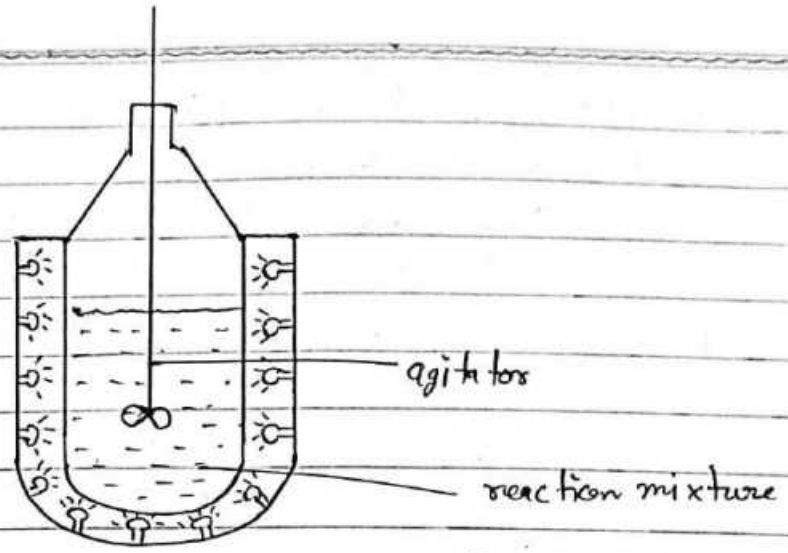
$$\boxed{kC_{A_0}^2\tau = \frac{(1+\varepsilon_A)^3}{2}\left\{\frac{X_A(2-X_A)}{(1-X_A)^2}\right\} - 3\varepsilon_A(1+\varepsilon_A)^2\left\{\frac{X_A}{1-X_A}\right\} - 3\varepsilon_A^2(1+\varepsilon_A)\ln(1-X_A) - \varepsilon_A^3 X_A}$$

4.5 Adiabatic Reactor ⇒



ab adiabatic Reactor एक विशेष प्रकार का reactor है। जिसका use ch. Ind. में reactant को product में Convert करने के लिए किया जाता है। इसमें स्टा. धातु के बने हुए Cylindrical vessel का प्रयोग किया जाता है। जिसे vertic position में व्यवस्थित किया जाता है। ~~जिसे~~ vertice इसका dia. 1-2 meter व ऊँचाई 3-4 meter के बीच रखी जाती है। इसके अन्दर reaction mix. को भर दिया जाता है। जब reaction को start कर दिया जाता है। जैसे-2 reactio आगे बढ़ती जाती है। ~~वैसे~~ reactant का कुछ भाग product में Convert होता जाता है reaction mix. को Continuosly mix करने के लिए agitator का use किया जाता है। reactor के चारों ओर insulation की एक मोटी परत चढ़ायी जाती है। जिसकी मोटाई 5-10 cm रखी जाती है। इस process में दो प्रकार की reactio use में लायी जाती है। जिन्हें exothermic व endothermic reaction से show किया जाता है। वह reaction जिसमें ऊष्मा उत्सर्जित की जाती है। exothermic कहा जाता है। तथा वह reaction जिसमें ऊष्मा अवशोषित की जाती है। उसे endothermic reaction कहा जाता है। adiabatic reactor में भी insulation परत चढ़ायी जाती है। उसका मुख्य कार्य उत्पन्न होने वाली ऊष्मा को न तो reactor से बाहर जाने देता है। और न ही अवशोषित की जाने वाली ऊष्मा को reactor के अन्दर प्रवेश करने देता है। इस process में जो भी heat उत्सर्जित व अवशोषित की जाती है। उसका मुख्य कार्य reaction mix. के temp. को बढ़ाने, ठण्डा करने के लिए किया जाता है। इस प्रकार के reactor को adiabatic reactor कहा जाता है। इसकी η 80-90% के बीच होती है।

4.6 photochemical reactor ⇒



photochemical reactor एक विशेष प्रकार का reactor है। जिसका use ch. Ind. में reactant को product में Convert करने के लिए किया जाता है। Chemical Industries में use में लाये जाने वाली कुछ ch. reaction में कुछ ch. reaction ऐसी होती है। जिसमें Ultra Violet व infra Red की किरणों की आवश्यकता होती है। इस प्रकार की reaction के लिए photochemical reactor का use किया जाता है। इसमें काँच के बने हुए cylindrical vessel का प्रयोग किया जाता है। जिसे vertical position में व्यवस्थित किया जाता है। इसका dia. 1-2 meter व ऊँचाई 3-4 m. के बीच रखा जाता है। इसमें react mix. को भर दिया जाता है। और reaction को start कर दिया जाता है। जैसे² reaction आगे बढ़ती जाती है। reactant का कुछ भाग ch. reaction के द्वारा product में Convert हो जाता है। reaction mix. को continuosly mix करने के लिए एक agitator का use किया जाता है। तथा इस reactor के चारो तरफ UV lamp or IR lamp लगाये जाते है। जिनसे निकलने वाली Rays rate of reaction का मान बढ़ाने में सहायता करती है। जिससे कम समय में अधिक product प्राप्त होता है। वह तंरगे जिसकी तंरगदैर्ध्य 4000 Angstrom से कम होती है। उसे Ultro Violet rays कहा जाता है। तथा वह तंरगे जिनकी तंरगदैर्ध्य का मान 8000 Angstrom से अधिक होता है। उसे Infra Red Rays कहा जाता है। इस प्रकार के reactor को photochemical reactor कहा जाता है। इसकी η 90 - 95% के बीच होती है।

Q1. Calculate fractional Conversion X_A of reactant A for the first order irreversible ch. reaction $A \rightarrow R$ taking place in A Continuous stirred tank reactor and plug flow reactor ($k\tau = 0.50$)

Ans. For C.S.T.R. ⇒

$$k\tau = \frac{X_A(1+\varepsilon_A X_A)}{(1-X_A)}$$

$A \rightarrow R$

$$\varepsilon_A = \frac{1-1}{1} = 0$$

$$k\tau = \frac{X_A}{1-X_A}$$

$$X_A = k\tau(1-X_A)$$

$$X_A = k\tau - k\tau X_A$$

$$X_A + k\tau X_A = k\tau$$

$$X_A(1+k\tau) = k\tau$$

$$X_A = \frac{k\tau}{1+k\tau} \qquad X_A = \frac{0.50}{1.50} \qquad X_A = 0.333$$

$$X_A = 33.33\%$$

For PFR ⇒

$$k\tau = -(1+\varepsilon_A)\ln(1-X_A) - \varepsilon_A X_A$$

$$k\tau = -\ln(1-X_A)$$

$$\ln(1-X_A) = -k\tau$$

$$1-X_A = e^{-k\tau}$$

$$X_A = 1-e^{-k\tau}$$

$$X_A = 1-e^{-0.50}$$

$$X_A = 1-0.606$$

$$X_A = 0.3930$$

$$X_A = 39.30\%$$

Q2. एक Batch reactor में निम्न reaction हो रही है $A \rightarrow R$, $-r_A = 0.05 C_A^2$ तथा $C_{A0} = 5$ minute है तो A का 80% Conversion होने में कितना समय लगेगा।

Ans.

$$t = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A} \qquad t = 5 \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{0.05 C_A^2}$$

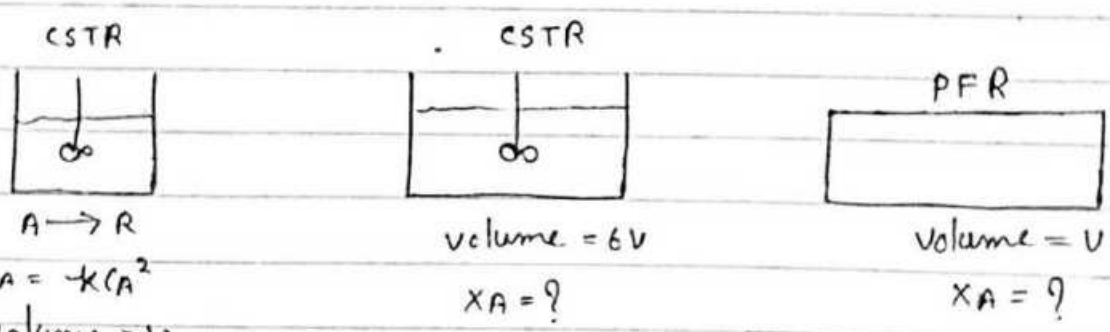
$$t = \frac{5}{0.05} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{C_A^2 (1-X_A)^2} \Rightarrow \frac{5}{5 \times 0.05} \int_0^{X_A} (1-X_A)^{-2} dX_A$$

$$t = \frac{1}{0.25} \times \left[\frac{1}{(1-X_A)(-2+1)} \right]$$

$$t = \frac{1}{0.25} \times \left[\frac{1}{(0.2)(-1)} - \frac{1}{1(-1)} \right] = \frac{1}{0.25} (-5+1) = \frac{-4}{25} \times 100$$

$$= 16 \text{ min}$$

Q3.



Ans.

$$kC_{A0}\tau = \frac{X_A}{(1-X_A)^2}$$

$$kC_{A0}\tau = \frac{0.50}{(1-0.50)^2} \qquad kC_{A0}\tau = \frac{0.50}{(0.50)^2} = 2$$

$$6(kC_{A0}\tau) = \frac{X_A}{(1-X_A)^2}$$

$$12 = \frac{X_A}{(1-X_A)^2}$$

X_A का मान 1 से ज्यादा नहीं हो सकता है।

$$X_A = 12(1 - 2X_A + X_A^2)$$
$$X_A = 12 - 24X_A + 12X_A^2$$
$$12X_A^2 - 25X_A + 12 = 0$$
$$12X_A^2 - 16X_A - 9X_A + 12 = 0$$
$$4X_A(3X_A - 4) - 3(3X_A - 4) = 0$$
$$(4X_A - 3)(3X_A - 4) = 0$$

$4X_A - 3 = 0$ $\qquad X_A = 3/4 = 0.75$ Ans.

$3X_A - 4 = 0$ $\qquad X_A = \frac{4}{3} = 1.33$

PFR ⇒

$$kC_{A0}\tau = (1+\varepsilon_A)^2\left(\frac{X_A}{1-X_A}\right) + 2\varepsilon_A(1+\varepsilon_A)\ln(1-X_A) + \varepsilon_A^2 X_A$$

$$kC_{A0}\tau = \frac{X_A}{1-X_A}$$

$$\frac{X_A}{1-X_A} = 2$$
$$X_A = 2 - 2X_A$$
$$3X_A = 2$$
$$X_A = \frac{2}{3} = 0.666$$
$$= 66.66\%$$

Q4. In an isothermal batch reactor 70% of a reactant A is converted in 13 minutes. find the space time and Space velocity needed to effect this conversion in PFR and CSTR.

Ans.

Batch reactor for $n=1$

$$-\ln(1-X_A) = kt$$
$$X_A = 0.70 \quad t = 13\text{ min.}$$
$$-\ln(1-0.70) = k \times 13$$
$$k = 0.0926\ (\text{min})^{-1}$$

For CSTR ⇒ $\tau = \frac{C_{A0}X_A}{(-r_A)}$

$$\tau = \frac{C_{A0} \cdot X_A}{k C_A} = \frac{\cancel{C_{A0}} \cdot X_A}{k \cancel{C_{A0}} (1 - X_A)}$$

$$= \frac{X_A}{k(1 - X_A)} = \frac{0.70}{0.0926\,(1 - 0.7)} = 25.2 \text{ min.}$$

For PFR

$\tau_p =$ t for batch reactor $= 13$ min

$$\frac{V}{F_{A0}} = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)}$$

$$\tau = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} = \cancel{C_{A0}} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{k \cancel{C_{A0}} (1 - X_A)}$$

$$= \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{k(1 - X_A)} \qquad \tau = \frac{1}{k} \left[-\ln(1 - X_A) \right]_0^{0.7}$$

$$= \frac{1}{0.0926} \left[-\ln(1 - 0.7) \right] = 13 \text{ min.}$$

Kamal Rathor

Chapter - 5 Comparision of Reactors

Size Comparision for Single Reactors → C.P.I. में जहाँ पर विभिन्न - विभिन्न Process व Unit operations की help से अनेक प्रकार के उपयोगी पदार्थों का manufacture किया जाता है। वहाँ पर reactant को product में convert करने के लिए अनेक प्रकार के reactor भी use में लाए जाते हैं। C.P.I. में use में लाए जाने वाले reactors को तीन भागों में वर्गीकृत किया जाता है। जिन्हें batch reactor, Semi batch reactor, व Continuous reactor से प्रदर्शित किया जाता है।

Batch Reactor में Reactant को एक बार भर दिया जाता है और कुछ समय पश्चात Product व Unconverted reactant को Reactor से बाहर निकाल लिया जाता है। जबकि Continuous reactor में Reactant को Continuosly feed किया जाता है। तथा Product व Unconverted reactant को भी Continuously reactor से बाहर निकाला जाता है।

Continuous Reactor दो प्रकार के होते हैं। जिन्हें CSTR व PFR से show किया जाता है। इनके आकार की तुलना करने के लिए design equation use में लायी जाती है।

Design equation for Continuous stirred tank Reactor :→

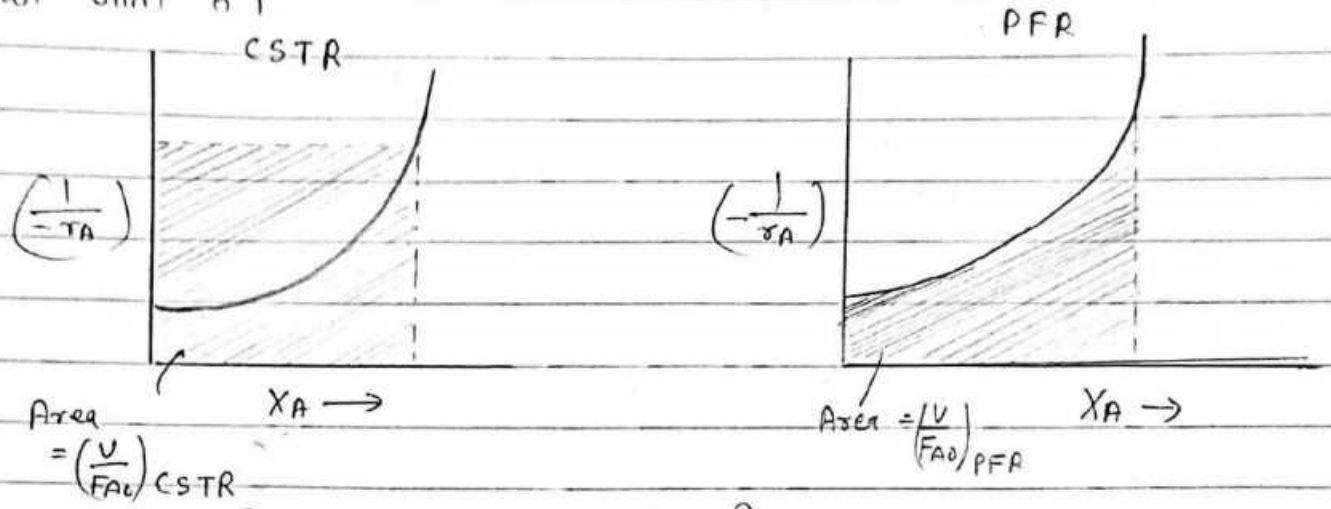
$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{X_A}{-r_A}$$

Design equation for Plug flow reactor :→

$$\frac{V}{F_{A0}} = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A}$$

CSTR व PFR के आकार की तुलना करने के लिए Graphically method का use किया जाता है। इस method में Reactant के fractional Conversion को X - अक्ष पर show किया जाता है।

और $\left(\frac{1}{-r_A}\right)$ को y-अक्ष पर show किया जाता है और एक ग्राफ बनाया जाता है। जिसके आधार पर CSTR व PFR के आकार की तुलना की जाती है।



CSTR में जो ग्राफ बनाया जाता है। उसमें जो Area प्राप्त होता है। उसके आधार पर CSTR का volume ज्ञात किया जाता है। इसी प्रकार से PFR के लिए भी X_A व $\frac{1}{-r_A}$ में ग्राफ बनाया जाता है। यहाँ पर जो Curve के नीचे का Area होता है। उसके आधार PFR का volume ज्ञात किया जाता है।

इस ग्राफ से ये निष्कर्ष प्राप्त होता है।

कि यदि feed Condition समान रखी जाती है, और Reactant के fractional Conversion का मान भी समान होता है। तो CSTR का volume, PFR के volume से अधिक आवश्यक होता है। क्योंकि PFR में average rate of reaction का मान CSTR की तुलना में अधिक होता है। इसलिए PFR में कम volume पर भी अधिक Conversion प्राप्त होता है। यदि दो Reactor CSTR व PFR समान आयतन के use में लाए जाते है। तो CSTR की तुलना में PFR में fractional Conversion प्राप्त का मान अधिक प्राप्त होता है।

5.2 Comparision of Batch Reactor with plug flow Reactor =>

Batch reactor व plug flow reactor का प्रयोग C.P.I. में Reactant को product में Convert करने के लिए किया जाता है। Batch Reactor में एक खाली पात्र का use किया जाता है।

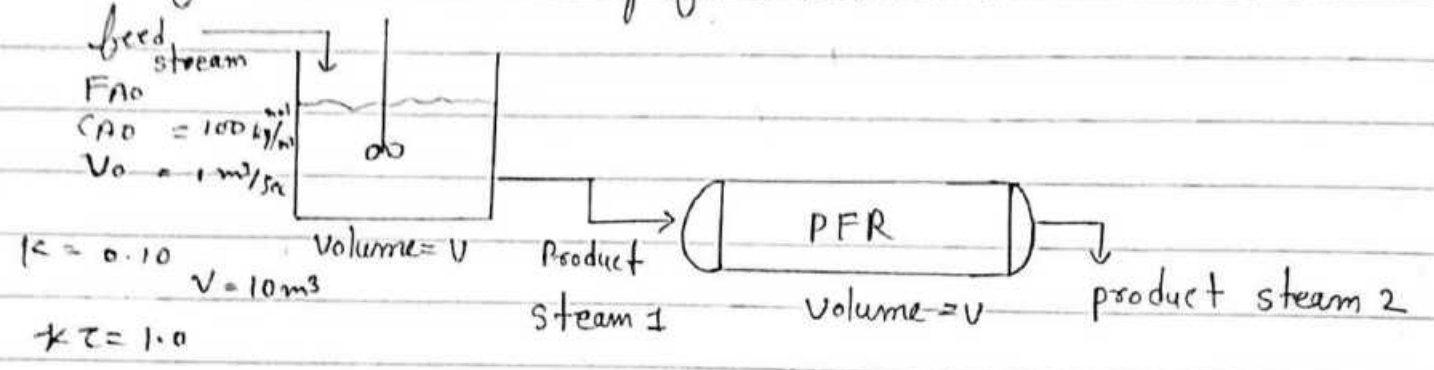
जिसमें Reaction mixture को भर दिया जाता है और reaction को start कर दिया जाता है। जैसे - जैसे Reaction आगे बढ़ती जाती है। Reactant का कुछ भाग अभिक्रिया के द्वारा Product में Convert हो जाता है। और कुछ समय पश्चात Product व Unconverted Reactant को Reactor से बाहर निकाल लिया जाता है।
जबकि PFR में Reactant को Continuosly reactor में enter कराया जाता है और product व Unconverted Reactant को भी Continuosly Reactor से ~~out~~ बाहर निकाल लिया जाता है। Batch reactor में Reactant का fractional Conversion time पर depend करता है। जबकि PFR में Reactant का fractional Conversion Reactor के volume पर निर्भर करता है। Batch reactor व PFR में difference को निम्नलिखित table द्वारा show किया जाता है।

S.No.	Batch Reactor	Plug flow reactor
1.	Small instrumentation Cost	large instrumentation Cost
2.	Flexibility of operation (May Be shut down easily and Quickly)	2. Non flexiblity of operation (May not be shut down easily and Quickly).
3.	More time is required to empty, clean and Refill	less time is required to empty, clean and Refill
4.	High labour And handling Cost	low labour And handling Cost
5.	Poor Quality Control of product	Better Quality Control of product
6.	Suitable for Small Scale operations	Suitable for handling of material in large amount

Study of Combined Reactor → जब किसी process में एक Reactor से निश्चित Conversion प्राप्त नहीं होता है तो एक से अधिक Reactor Series में लगाए जाते हैं। जिसे Combined Reactor कहा जाता है।

(i) Mixed flow Reactor ⟶ Plug flow Reactor
(ii) Plug flow reactor ⟶ Mixed flow Reactor

(i) Mixed flow Reactor → Plug flow Reactor →



यहाँ पर एक दो Reactor का Combination Show किया गया है। जिसका प्रयोग C.P.I. में Reactant को product में Convert करने के लिए किया जाता है। यहाँ पर feed steam को पहले एक mixed flow reactor में enter कराया जाता है। जहाँ पर chemical reaction के द्वारा Reactant का कुछ भाग Product में Convert किया जाता है। यहाँ पर reaction mixer को Continuously mix करने के लिए एक Agitator का use किया जाता है। यहाँ पर mixed flow reactor के volume को V से व Space time τ से प्रदर्शित किया जाता है तथा Chemical reaction को $A \rightarrow R$ से show किया जाता है। इसका order $n=1$ व Rate Constant को k से show किया जाता है जो feed steam enter करती है उसमें Reactant A की Conc को C_{A0} द्वारा show किया जाता है तथा यहाँ से जो product steam बाहर निकलती है। उसमें Reactant A की Conc को C_{Af} द्वारा show किया जाता है। इसका मान निम्न प्रकार से निकाला जाता है।

$$k C_{A0}^{n-1} \tau = \frac{X_A (1+\varepsilon_A X_A)^2}{(1-X_A)^n} \qquad n=1,\ \varepsilon_A = 0$$

$$k\tau = \frac{X_A}{1-X_A}$$

$$X_A = k\tau(1-X_A)$$

$$X_A = k\tau - k\tau X_A$$

$$X_A + k\tau X_A = k\tau$$

$$X_A(1+k\tau) = k\tau$$

$$X_A = \frac{k\tau}{1+k\tau} = \frac{1}{1+1} = \frac{1}{2} = 0.50$$

$$\cancel{C_{Af_1} = C_{A0}(1-X_A)} \qquad C_{A1} = C_{A0}(1-X_A)$$

$$\cancel{X_A = \frac{C_{Af_1} - C_{Af_2}}{C_{Af_1}}} \qquad X_A = \frac{C_{A1} - C_{A2}}{C_{A1}}$$

mixed flow reactor से जो Product steam प्राप्त होती है। उसका प्रयोग PFR में feed steam के रूप में किया जाता है। जब यह feed steam PFR में enter करती है। तो chemical reaction के द्वारा reactant A का कुछ भाग product में Convert हो जाता है। यहाँ पर PFR के volume को v से show किया जाता है। space time को τ से व chemical reaction को $A \rightarrow R$ से show किया जाता है। $n=1$ तथा Rate Constant को k से show किया जाता है। यहाँ से जो Product steam बाहर निकलती है। उसमें Reactant A की Conc को C_{Af_2} द्वारा show किया जाता है। इसका मान निम्न प्रकार से निकाला जाता है।

$$k\tau = -\ln(1-X_A)$$

$$\ln(1-X_A) = -k\tau$$

$$1-X_A = e^{-k\tau}$$

$$X_A = 1 - e^{-k\tau}$$

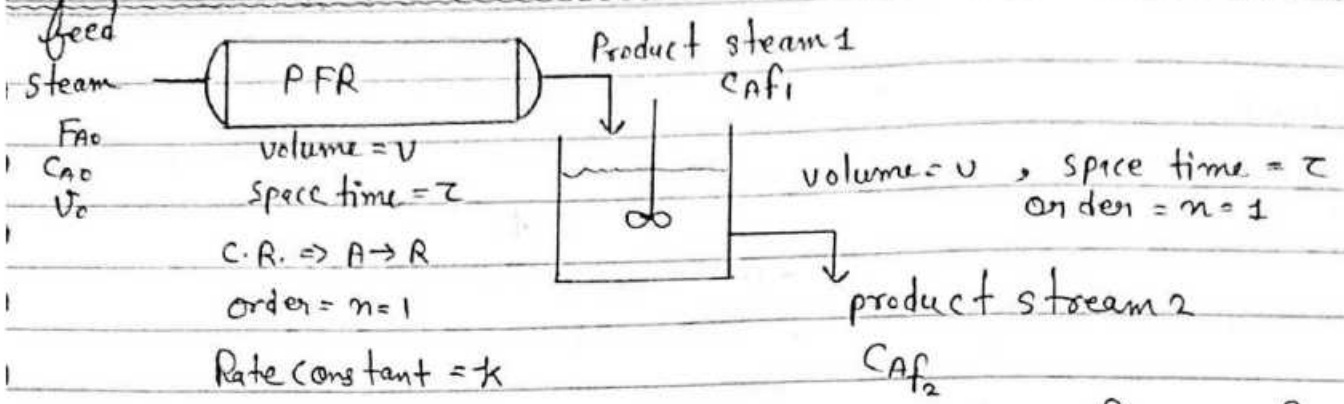
$$C_{Af_2} = C_{Af_1}(1-X_A)$$

Overall fractional Conversion of reactant A

$$= \frac{C_{A0} - C_{Af_2}}{C_{A0}}$$

$$X_A = 1 - e^{-k\tau}$$

Plug flow Reactor → Mixed flow reactor ⇒ यहाँ पर दो reactor का Combination show किया गया है। जिसमें पहले



एक PFR लगाया जाता है। feed ~~stream~~ को पहले ~~PFR में enter कराया जाता है। जहाँ पर chemical~~ उसके पश्चात mixed flow reactor लगाया जाता है। feed stream को पहले PFR में enter कराया जाता है। जहाँ पर chemical reaction के द्वारा reactant का कुछ भाग product में Convert किया जाता है। यहाँ Space time को τ से, chemical reaction को A → R से, order को n = 1 से, Rate constant को k से show किया जाता है। यहाँ से जो product stream 1 प्राप्त होती है। उसमें Reactant A की Conc को C_{Af_1} द्वारा show किया जाता है। इसका मान निम्न सूत्र द्वारा ज्ञात किया जाता है

$$X_A = \cancel{te}\ 1 - e^{-k\tau}$$

$$C_{Af_1} = C_{A0}(1 - X_A)$$

PFR से जो product stream 1 प्राप्त होती है। उसका use mixed flow reactor में feed stream के रूप में किया जाता है। यहाँ पर reaction mix को Continuously mix करने के लिए एक agitator का use किया जाता है। जब product stream 1 mixed flow reactor में enter करती तो C.R. के द्वारा Reactant का कुछ भाग product में Convert हो जाता है। यहाँ ~~MFR~~ MFR के volume को V से, space time को τ से, Rate Constant को k से, order को n = 1 से, Ch. reaction को A → R से show किया जाता यहाँ से जो product stream 2 प्राप्त होती है। उसमें Reactant A की Conc को C_{Af_2} द्वारा show किया जाता है। इसका मान निम्न प्रकार से निकाला जाता है

$$X_A = \frac{k\tau}{1 + k\tau}$$

$$C_{Af_2} = C_{Af_1}(1 - X_A)$$

overall fractional conversion of reactant

$$\boxed{-A = \frac{C_{A0} - C_{Af_2}}{C_{A0}}}$$

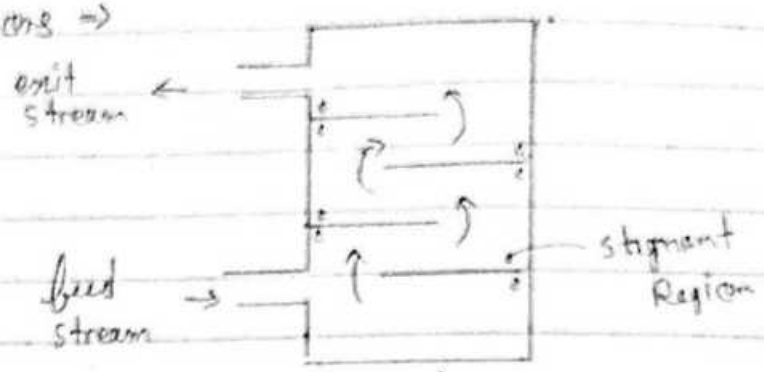
6.1. Deviation from Ideal flow ⇒ C.P.I. में जहाँ पर विभिन्न Unit process व Unit operation की help से अनेक प्रकार के उपयोगी पदार्थों का manufacture किया जाता है। वहाँ पर reactants को product में Convert करने के लिए विभिन्न प्रकार के Reactors भी उपयोग में लाये जाते हैं। जिनमें मुख्य रूप से C.S.T.R व PFR भी उपयोग में लाये जाते हैं। C.S.T.R. व PFR को Ideal flow reactor माना जाता है। लेकिन Chemical industries में जो Reactor उपयोग में लाये जाते हैं। उसमें liquid का flow pattern न तो Ideal C.S.T.R के समान होता है और ना ही PFR के समान होता है। बल्कि इनके मध्य में होता है। ~~बल्कि इनके मध्य~~ इस प्रकार के Reactors को non-Ideal reactors कहा जाता है। किसी भी Ideal flow reactor में Reactants का fractional Conversion design eqn की help से ज्ञात किया जाता है। लेकिन यदि किसी Reactor में non-ideal flow pattern भी उपस्थित रहता है। तो इस अवस्था में Reactants के fractional Conversion ज्ञात करने के लिए किसी निश्चित design equation का use नहीं किया जाता है। इस प्रकार के flow pattern को deviation from ideal flow कहा जाता है।

C.P.I. में use में लाए जाने equipment में उपस्थित रहने वाले non-Ideal flow pattern को 4 भागों में बाँटा जाता है।

1. stagnant Regions
2. short Circuiting
3. channeling
4. Extreme short circuiting and Bypassing.

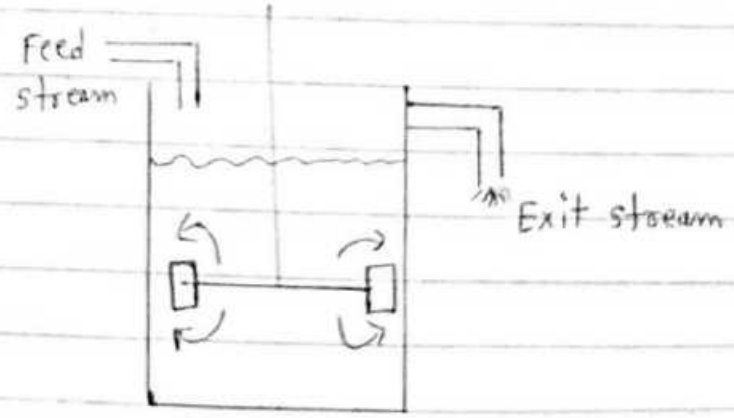
जब कोई Ideal flow अपनी दिशा में प्रवाह करता है तो एक समय पर वह अपनी दिशा से विचलित हो जाता है तो इसे deviation from Ideal flow कहा जाता है।

① Stagnant Regions ⇒



यहाँ पर पहले प्रकार का non ideal flow pattern दिखाया गया है। जो किसी process equipment में उपस्थित रहता है। यहाँ पर जो feed stream enter करती है। उसका कुछ भाग तो निश्चित समय के पश्चात equipment में से बाहर निकल जाता है। और liquid का कुछ भाग stagnant (स्थिति) ~~region~~ के रूप में जमा हो जाता है। और कभी भी बाहर नहीं निकल पाता है। इसे stagnant region कहा जाता है।
stagnant region के कारण process equipment की efficiency कम हो जाती है। तथा इस equipment का use ch. Ind. में reactor के रूप में किया जाता है तो इसमें Reactant का जो Conversion प्राप्त होता है वह ideal flow reactor की तुलना में कम प्राप्त होता है।

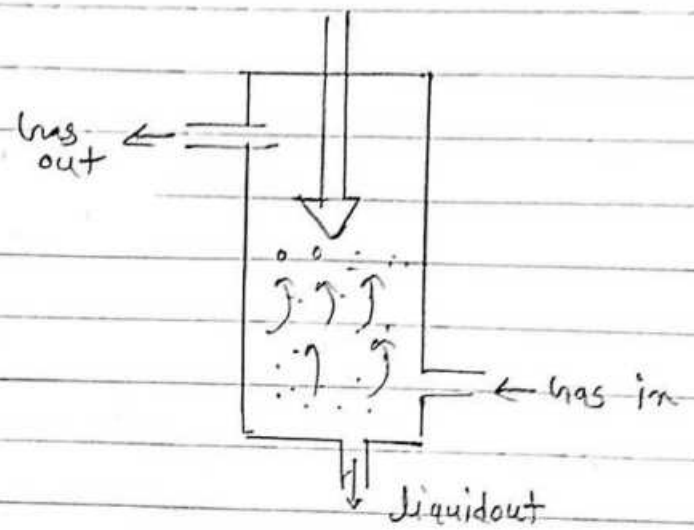
② Short circuiting →



यहाँ पर दूसरे प्रकार का Non-Ideal flow pattern दिखाया गया है। जो किसी process equipment में उपस्थित रहता है। यहाँ पर एक process equipment का use liquid को mix करने के लिए किया जाता है। यहाँ पर जो feed stream enter करती है उसका

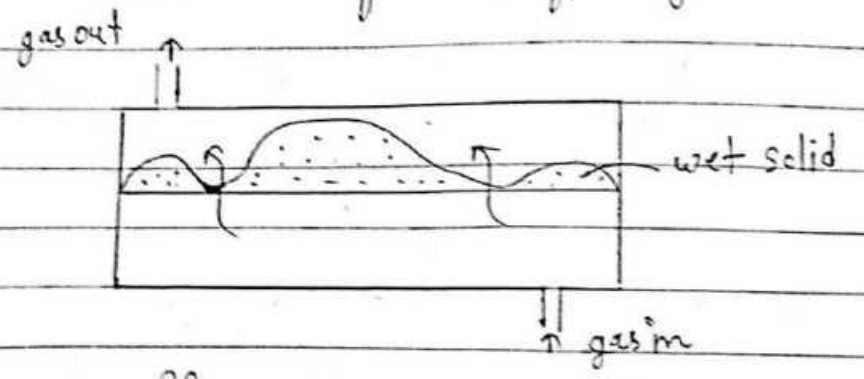
कुछ भाग तो mix होने के बाद ही equipment से बाहर निकल जाता है लेकिन liquid का कुछ भाग बिना mix हुए ही equipment से बाहर निकल जाता है। इसे short circuiting कहा जाता है। short circuiting के कारण process equipment की η कम हो जाता है तथा जहाँ इस equipment का use ch. Ind. में Reactor के रूप में किया जाता है तो इससे reactant का जो fractional Conversion प्राप्त होता है तो वह Ideal flow reactor की तुलना में कम होता है।

Chat channling ⇒



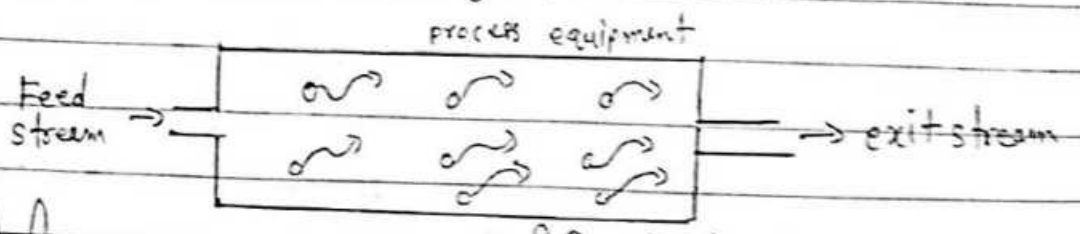
यहाँ पर एक तीसरे प्रकार का non-ideal flow pattern दिखाया गया है जो किसी process equipment में उप० रहता है। यहाँ पर एक absorption column का use gas को liquid में absorve कराने के लिए किया जाता है। यहाँ पर ~~जो gas enter~~ absorption column में जो gas enter करती है। उसका कुछ भाग तो liquid के द्वारा absorve कर लिया जाता है। लेकिन gas का कुछ भाग बिना liquid के Contact में आये सीधे equipment से बाहर निकल जाता है। इसे channling कहा जाता है। channling के कारण process equipment की η कम हो जाती है। तथा जब इस equipment का use C.P.I. में reactor के रूप use किया जाता है। तो reactant का जो fractional Conversion प्राप्त होता है वह ideal flow की तुलना में कम होता है।

Extreme short circuiting and Bypassing ⇒



यहाँ पर एक चौथे प्रकार non-ideal flow pattern दिखाया गया है जो किसी process equipment में उप० रहता है। यहाँ पर एक process equipment का use wet solid में उप० moisture को remove करने के लिए किया जाता है। यहाँ पर जो gas enter करती है उसका कुछ भाग तो moisture remove करने के लिए ~~यहाँ पर जो~~ use में लाया जाता है लेकिन gas का कुछ भाग बिना wet solid के सम्पर्क में आये बिना सीधे equipment से बाहर निकल जाता है। इसे extreme short circuiting and bypassing कहा जाता है। इसके कारण process equipment की η कम हो जाती है तथा जब इस equipment का use C.I. में reactor के रूप में use किया जाता है। reactant का जो fractional conversion प्राप्त होता है वह ideal flow की तुलना में कम प्राप्त होता है।

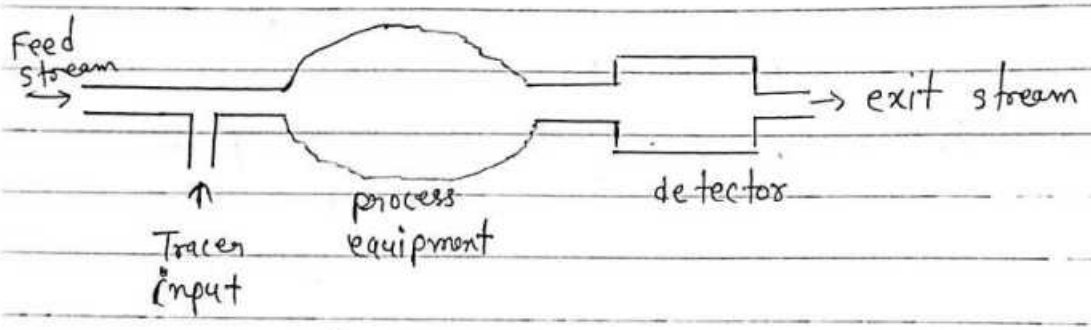
Residence time distribution function ⇒



जब किसी process equipment में कोई feed stream enter करती है तो feed stream के different fraction (elements) अलग - अलग मार्ग से pass करते हैं और उनके द्वारा process equipment में spend किया गया time भी अलग - अलग होता है। किसी भी feed stream के fraction के process equipment में enter करने व बाहर

Tracer - रंगीन पदार्थ

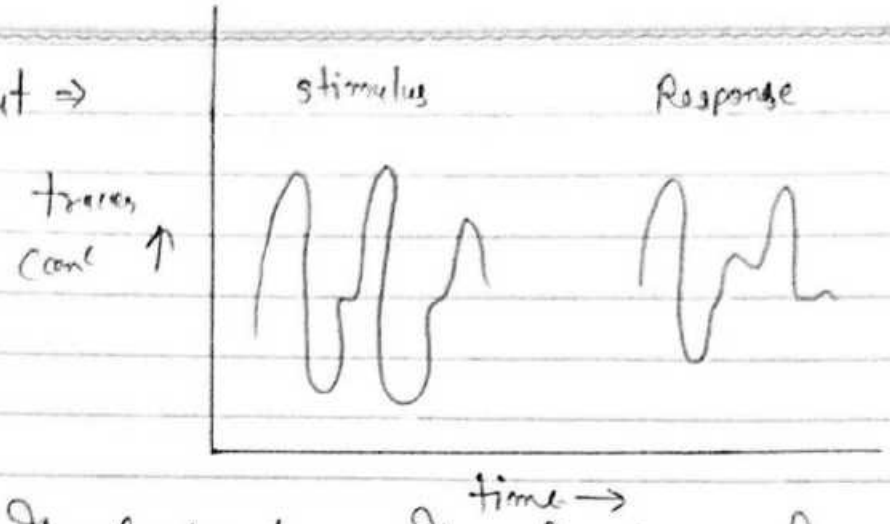
निकलने के मध्य में जो समय अन्तराल लगता है। तो उसे Residence time कहा जाता है। तथा वह fraction feed stream के different fraction व Residence time में संबंध को प्रदर्शित करता है। उसे Resisdence time distribution function कहा जाता है। जब किसी process equipment में non-ideal flow pattern उप० रहता है। इस Condition में reactor के fraction Conversion का मान ज्ञात करने के लिए किसी निश्चित design eqn का प्रयोग नही किया जाता है। तथा ऐसी अवस्था reactant के fractional Conversion का मान ज्ञात करने के लिए RTDF का use किया जाता है। किसी भी process equipment में RTDF का मान ज्ञात करने के लिए stimulus Respone technique का प्रयोग किया जाता है



इस Technic में process equipment में जो feed stream enter करती है उसमें tracer मिलाया जाता है। tracer की Conc को समय के साथ परिवर्तित किया जाता है। तथा exit stream में tracer की Conc को detector की सहायता से detect किया जाता है। Feed stream में जो tracer मिलाया जाता है। stimulus कहा जाता है। और exit stream में जो tracer की Conc को detector की सहायता से detect किया जाता है। वह response कहलाता है। stimulus और response की waveform में जो अन्तर आता है। उसके आधार RTDF का मान ज्ञात किया जाता है। stimulus response technique में 4 प्रकार की technique का use किया जाता है।

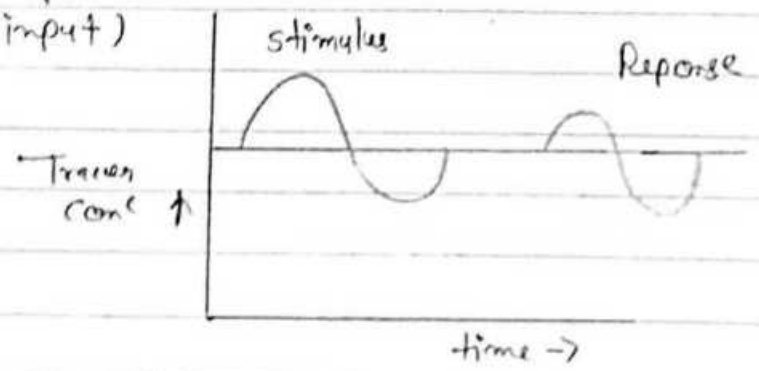
1. Random input
2. Cyclic input
3. step input
4. pulse input

① Random input ⇒



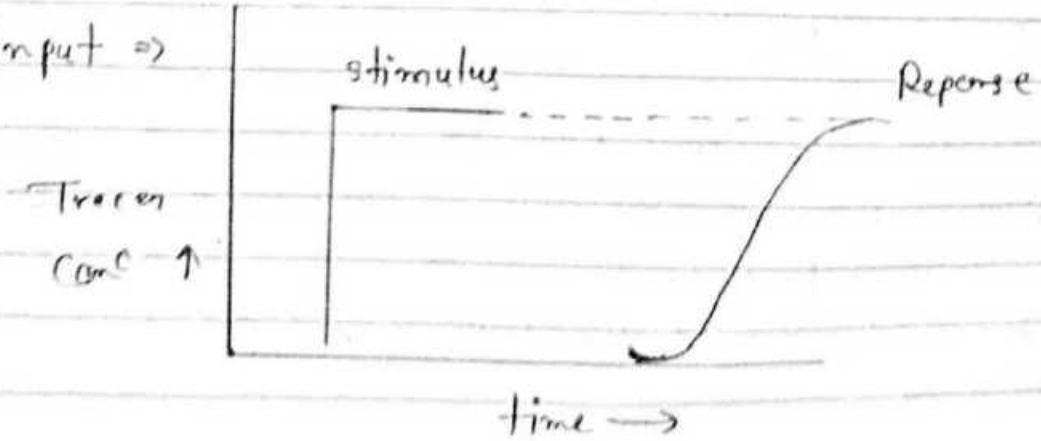
Random input में feed stream में जो tracer दिया जाता है। इसकी Conc को Randomly परिवर्तित किया जाता है। इसका response में Randomly प्राप्त होता है। लेकिन इसकी wave form में कुछ अन्तर आ जाता है।

② Cyclic input ⇒
(periodic input)



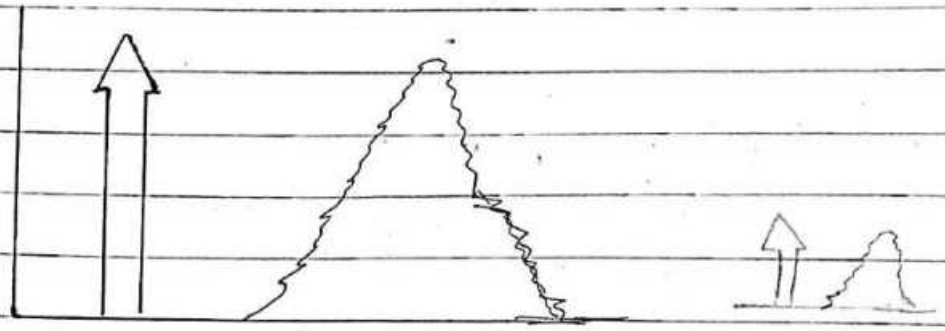
cyclic input में tracer की Conc को Cyclically परिवर्तित किया जाता है। इसका response भी Cyclically प्राप्त होता है। लेकिन इसकी waveform में कुछ अन्तर आ जाता है।

③ Step input ⇒



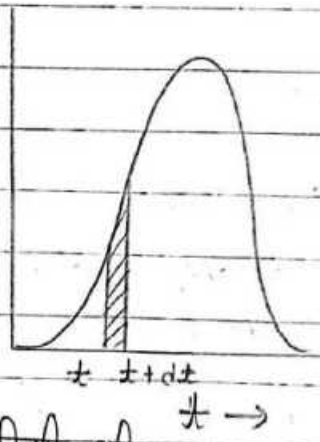
step input में जो tracer मिलाया जाता है। उसकी Conc को अचानक बहुत अधिक बढ़ाया दिया जाता है। और लगातार high Conc का tracer feed stream में मिलाया जाता है। लेकिन exit stream में Conc धीरे-धीरे बढ़ने लगती है। और बाद में Constant हो जाती है

(iv) pulse input ⇒



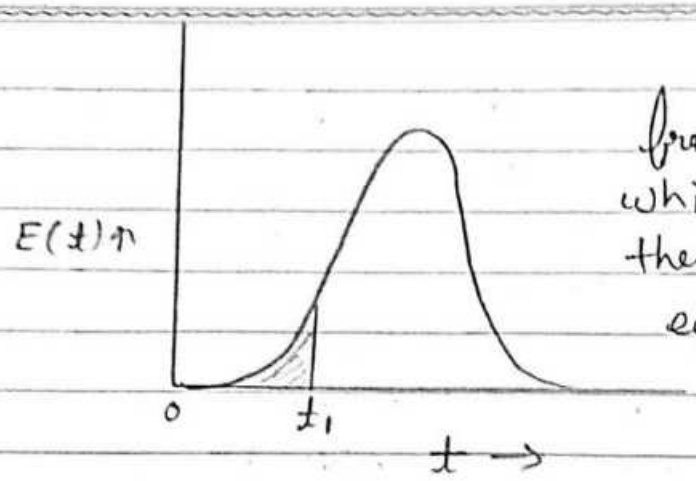
pulse input में feed stream में जो tracer मिलाया जाता है। उसकी Conc को बहुत कम समय के लिए बहुत अधिक मात्रा में बढ़ा दिया जाता है। लेकिन exit stream में tracer की Conc को 0 से बढ़कर maximum हो जाती है और maximum से घटकर वापिस 0 हो जाती है।

E Curve ⇒



$E(t)\,dt$ = fraction of feed stream which spends time between t and $t + dt$ in the process equipment.

E Curve का use किसी भी process equipment में RTDF को show करने के लिए किया जाता है। यहाँ पर feed stream के fraction को y-axis पर show किया जाता है और Residence time को x-axis प्रदर्शित किया जाता है। इसके पश्चात feed stream का वह भाग जो समय $t + dt$ के मध्य equipment में उपस्थित रहता है उसे shaded area द्वारा प्रदर्शित किया जाता है।



fraction of feed stream which spends time less then t_1 in the process equipment

$$= \int_0^{t_1} E(t)\,dt$$

fraction of feed stream which spends time more then t_1 in the process equipment

$$= \int_{t_1}^{\infty} E(t)\,dt$$

Total fraction of feed stream

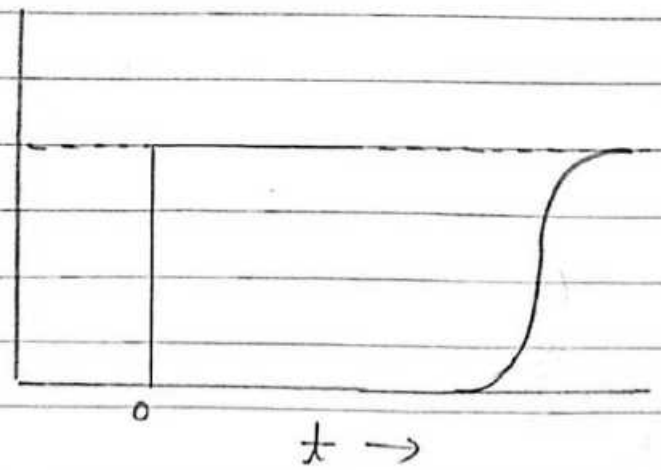
$$= \int_0^{t_1} E(t)\,dt + \int_{t_1}^{\infty} E(t)\,dt$$

$$= \int_0^{\infty} E(t)\,dt$$

$$= 1$$

feed stream का वह भाग t_1 से कम समय equipment से बाहर निकलता है उसे shaded area द्वारा show किया जाता है। वह भाग t_1 से ज्यादा समय से बाहर निकलता है उसे plane Curve कहा जाता

F Curve ⇒



step input

$c(t) = 0 \quad t < 0$

$c(t) = C_0 \quad t \geq 0$

F curve का प्रयोग किसी भी equipment में step input के repose को show करने के लिए किया जाता है। step input में tracer की Conc C_0 द्वारा show किया जाता है। और exit stream में tracer की Conc $C(t)$ द्वारा प्रदर्शित किया जाता है। इसके पश्चात $\frac{C(t)}{C_0}$ और time ग्राफ बनाया जाता है। इस ग्राफ पर stimulus और Response को प्रदर्शित किया जाता है। इस प्रकार से step Input का जो Response प्राप्त है। उसे F Curve कहा जाता है।

Half life time (अर्ध आयु काल):- किसी ch. reaction में वह समय जिस पर reactant की ~~सा~~ सान्द्रता Intial Conc. की आधी रह जाती है। उसे half life time कहा जाता है। इसके लिए eqn निम्न प्रकार निकाली जाती है।

$\boxed{A \rightarrow R}$ $\underset{n}{k}$

Consider A chemical reaction $A \rightarrow R$ taking place in A constant volume batch reactor.

$t = 0$ $\quad C_A = C_{A0}$

$t = \frac{1}{2}$ $\quad C_A = \frac{1}{2} C_{A0}$

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k C_A^n \quad \text{—— (i)}$$

C_A = Conc of reactant A at time $t = 0$
k = Rate Constant
n = order of the ch. reaction
$t_{1/2}$ = half life time of The ch. reaction.
C_{A0} = Conc. of reactant A at time $t = t$

समी. (1) का समाकलन करने पर

$$\frac{-dC_A}{C_A^n} = k\,dt$$

$$-C_A^{-n}\,dC_A = k\,dt$$

$$-\int_{C_{A0}}^{C_{A0}/2} C_A^{-n}\,dC_A = k\int_0^{t_{1/2}} dt$$

$$-\left[\frac{C_A^{-n+1}}{-n+1}\right]_{C_{A0}}^{C_{A0}/2} = k\,[t]_0^{t_{1/2}}$$

$$\frac{1}{n-1}\left[C_A^{-n+1}\right]_{C_{A0}}^{C_{A0}/2} = k\,t_{1/2}$$

$$\frac{1}{n-1}\left[\frac{1}{C_A^{\,n-1}}\right]_{C_{A0}}^{\frac{C_{A0}}{2}} = k\,t_{1/2}$$

$$\frac{1}{n-1}\left[\left(\frac{2}{C_{A0}}\right)^{n-1} - \left(\frac{1}{C_{A0}}\right)^{n-1}\right] = k\,t_{1/2}$$

$$\frac{1}{n-1}\left[\frac{2^{n-1}-1}{C_{A0}^{\,n-1}}\right] = k\,t_{1/2}$$

$$t_{1/2} = \frac{1}{k(n-1)}\left[\frac{2^{n-1}-1}{C_{A0}^{\,n-1}}\right]$$

$$\boxed{t_{1/2} = \frac{1}{k(n-1)}\left(2^{n-1}-1\right) C_{A0}^{\,1-n}}$$ eq^n for half life time of A chemical reaction.

$$\ln t_{1/2} = \ln\left[\frac{2^{n-1}-1}{k(n-1)}\right] + (1-n)\ln C_{A0}$$

$$y = c + m\,x,$$

for ~~first~~ zero order $n=0$

$$t_{1/2} = \frac{2^{-1}-1}{k(-1)}\,C_{A0}$$

$$t_{1/2} = \frac{-1/2}{-k}\,C_{A0}$$

$$\boxed{t_{1/2} = \frac{C_{A0}}{2k}}$$

for first order n=1

$$-\frac{dC_A}{dt} = kC_A$$

$$-\frac{dC_A}{C_A} = k\,dt$$

$$-\int_{C_{A0}}^{C_{A0}/2} \frac{dC_A}{C_A} = k\int_0^{t_{1/2}} dt$$

$$-\left[\ln C_A\right]_{C_{A0}}^{C_{A0}/2} = k\,t_{1/2}$$

$$-\left[\ln\left(\frac{C_{A0}}{2}\right) - \ln C_{A0}\right] = k\,t_{1/2}$$

$$-\ln\frac{\cancel{C_{A0}}}{2\cancel{C_{A0}}} = k\,t_{1/2}$$

$$-\ln\left(\frac{1}{2}\right) = k\,t_{1/2}$$

$$\ln 2 = k\,t_{1/2}$$

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$$

$$t_{1/2} = \frac{0.693}{k}$$

first order के लिए half life time का reactant intial conc पर निर्भर नहीं करता है बल्कि constant रहता है।

for Second order n=2

$$t_{1/2} = \frac{2-1}{k(1)}\,C_{A0}^{1-2}$$

$$\boxed{t_{1/2} = \frac{1}{kC_{A0}}}$$

zero order ⇒ ऐसी reaction जिसमें rate of reaction का मान reactant की Conc पर depend नहीं करता है।

ⓐ Zero order reaction:⇒ ~~ऐसी reaction जिसमें reactant की Conc time के साथ change नहीं होती है, zero order reaction कहलाती है।~~

ex:⇒ $H_2 + Cl_2 \longrightarrow 2HCl$

in general rate of reaction

$$-r = \frac{dx}{dt} = \frac{d[A]}{dt} = k[A]^0$$

Ⓑ First order reaction:- ऐसी reaction जिसकी अभिक्रिया की दर केवल एक molecule के Conc पर depend करती है, first order reaction कहलाती है।

$$A \longrightarrow \text{product}$$

Rate of reaction $-r = \frac{d[A]}{dt} = k[A]$

ex:⇒ $SO_2 + Cl_2 \longrightarrow SO_2Cl_2$

ⓒ Second order reaction:- ऐसी Reaction जिसकी rate of reaction दो molecule के Conc पर depend करता है, Second order reaction कहलाती है।

$$A + B \longrightarrow \text{product}$$

Rate of reaction $= -r = \frac{d[A]}{dt} = -k[A][B]$

ex:⇒ $CH_3COOC_2H_5 + NaOH \longrightarrow CH_3COONa + C_2H_5OH$

Ⓓ Third order reaction:⇒ ऐसी reaction जिसकी Rate of reaction molecule की Conc पर निर्भर करती है। third order reaction कहलाती है।

$$3A \longrightarrow \text{Product}$$

$$-r = \frac{d[A]}{dt} = k[A]^3$$

ex:⇒ $2NO + H_2 \longrightarrow N_2O + H_2O$

ⓐ Catalyst Reaction ⇒ वे अभिक्रियाएं जिनमें Catalyst का use rate of reaction अथवा गति को परिवर्तित करने के लिए किया जाता है, Catalyst reaction कहलाती है।

ex:⇒ $C_2H_4 + H_2 \xrightarrow[heat]{Ni} C_2H_5$

ⓑ Non-Catalytic reaction ⇒ वे अभिक्रियाएं जिनमें Catalyst का use नहीं होता है non-catalytic reaction कहलाती है।

ex:⇒ $NO + \frac{1}{2} O_2 \longrightarrow NO_2$

Autocatalytic Reaction ⇒ वह Reaction जिनमें product ~~react~~ Catalyst की तरह work (react) करता है। Autocatalytic Reaction कहलाती है।

ex:⇒ Decomposition of Nitroglycerine

Rate expression for :⇒

(i) Second order bimolecular irreversible ch. reaction ($A+B \rightarrow$ product)

2023
(ii) first order reversible ch. reaction $A \rightleftharpoons B$

(iii) Second order reversible ch. reaction $A + B \rightleftharpoons R+S$

(i) Rate expression for bimolecular Second order irreversible ch. reaction $A+B \longrightarrow$ product taking place in a constant volume batch reacto

$\boxed{A+B \rightarrow \text{prod}}$ Consider A bimolecular second order irr. ch. reaction $A+B \rightarrow$ product taking place in a C.V.B.R.

C_{A0} = Conc of Reactant A at time $t=0$
C_{B0} = Conc of Reactant B at time $t=0$
C_A = Conc of Reactant A at time $t=t$
C_B = Conc of Reactant B at time $t=t$
$-r_A$ = rate of ch. reaction of reactant A
X_A, X_B = fractional Conversion of reactant A, B
k = Second order Rate Constant

$$\frac{C_{B0}}{C_{A0}} = M \qquad \{ C_{B0} = M C_{A0} \}$$

$M \Rightarrow C_{B0}/C_{A0}$ be the intial molar ratio of reactant

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k C_A C_B \quad \text{—(i)}$$

$$X_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}$$

$$C_{A0} X_A = C_{A0} - C_A$$

$$C_A = C_{A0} - C_{A0} X_A$$

$$C_A = C_{A0}(1 - X_A) \quad \text{— (ii)}$$

अवकलन करने पर

$$\frac{dC_A}{dt} = -C_{A0}\frac{dX_A}{dt} \quad \text{—(iii)}$$

$A + B \rightarrow$ products

$C_{A0} \quad C_{B0} \quad (t=0)$

$C_A \quad C_B \quad (t=t)$

$$C_{A0} - C_A = C_{B0} - C_B$$

$$C_{A0}X_A = C_{B0} - C_B$$

$$C_B = C_{B0} - C_{A0}X_A$$

$$C_{B0} = MC_{A0} \qquad \left\{\frac{C_{B0}}{C_{A0}} = M \Rightarrow C_{B0} = MC_{A0}\right\}$$

$$C_B = MC_{A0} - C_{A0}X_A$$

$$C_B = C_{A0}(M - X_A) \quad \text{—(iv)}$$

समी. (ii), (iii) व (iv) का मान समी. (i) में रखने पर

$$\cancel{C_{A0}}\left(\frac{dX_A}{dt}\right) = kC_{A0}(1-X_A)\cancel{C_{A0}}(M-X_A)$$

$$\frac{dX_A}{dt} = kC_{A0}(1-X_A)(M-X_A)$$

$$kC_{A0}\,dt = \frac{dX_A}{(1-X_A)(M-X_A)}$$

$$kC_{A0}\int_0^t dt = \int_0^{X_A}\frac{dX_A}{(1-X_A)(M-X_A)}$$

$$kC_{A0}t = \int_0^{X_A}\frac{dX_A}{(1-X_A)(M-X_A)}$$

On breaking into partial fraction.

$$kC_{A0}t = \int_0^{X_A}\frac{dX_A}{(1-X_A)(M-X_A)}$$

$$\frac{1}{(1-X_A)(M-X_A)} = \frac{a(M-X_A) + b(1-X_A)}{(1-X_A)(M-X_A)}$$

$$1 = aM - aX_A + b - bX_A$$

$$\cancel{1 = a(M-X_A)}$$

$$1 = (aM + b) - X_A(a+b)$$

$$1 = aM + b$$

$$0 = a + b$$

$$b = -a$$

$$1 = aM - a$$

$$1 = a(M-1)$$

$$a = \frac{1}{M-1} \qquad b = -\frac{1}{M-1}$$

$$kC_{A0}t = \int_0^{x_A} \frac{a}{1-X_A}\, dX_A + \int_0^{x_b} \frac{b}{M-X_A}\, dX_A$$

a, b की value put करने पर

$$kC_{A0}t = \frac{1}{M-1}\int_0^{x_A} \frac{dX_A}{1-X_A} - \frac{1}{M-1}\int_0^{x_b} \frac{dX_A}{M-X_A}$$

$$kC_{A0}t = \frac{1}{M-1}\left[\left\{-\ln(1-X_A)\right\}_0^{x_A} - \left\{-\ln(M-X_A)\right\}_0^{x_B}\right]$$

$$kC_{A0}t = \frac{1}{M-1}\left[-\left\{\ln(1-X_A) - \ln 1\right\} + \left\{\ln(M-X_A - \ln M\right\}\right]$$

$$kC_{A0}t = \frac{1}{M-1}\left[-\ln(1-X_A) + \ln(M-X_A) - \ln M\right]$$

$$kC_{A0}t = \frac{1}{M-1}\left[\ln(M-X_A) - \ln M(1-X_A)\right]$$

$$kC_{A0}t = \frac{1}{M-1}\left[\ln\frac{(M-X_A)}{M(1-X_A)}\right]$$

$$\boxed{\ln\frac{(M-X_A)}{M(1-X_A)} = (M-1)\,kC_{A0}t}$$

Rate expression for bimolecular Second order irreversible.

(ii) Rate expression for first order reversible ch. reaction $A \rightleftharpoons R$ taking place in A constant volume batch reactor.

C_{A0} = Conc of reactant A at time $t = 0$
C_A = Conc of reactant A at time $t = t$
C_{R0} = Conc of reactant R at time $t = 0$
C_R = Conc of reactant R at time $t = t$
C_{Ae} = Conc of reactant A at equilibrium
C_{Re} = Conc of reactant R at equilibrium
X_A = fractional conversion of reactant A at time $t = t$
X_{Ae} = fractional conversion of reactant A at equilibrium
k_1 = first order rate constant
k_2 = first order rate constant
K_c = equilibrium constant $= k_1/k_2$

$\boxed{\frac{C_{R0}}{C_{A0}} = M}$ initial molar ratio of the reactant

$C_{R0} = M C_{A0}$

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_R \quad \text{—(i)}$$

$$X_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}$$

$$C_{A0} - C_A = C_{A0} X_A$$

$$C_A = C_A - C_{A0} X_A$$

$$C_A = C_{A0}(1 - X_A) \quad \text{—(ii)}$$

अवकलन करने पर

$$\frac{dC_A}{dt} = -C_{A0}\frac{dX_A}{dt} \quad \text{—(iii)}$$

$$A \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} R$$

$t = 0$ $\quad C_{A0} \quad C_{R0}$
$t = t$ $\quad C_A \quad C_R$ product of conc

$$C_{A0} - C_A = C_R - C_{R0}$$

$$C_R = C_{R0} + C_{A0} - C_A$$

$$C_R = C_{R0} + C_{A0} X_A$$

$$C_R = M C_{A0} + C_{A0} X_A$$

$$C_R = C_{A0}(M + X_A) \quad \text{—— (iv)}$$

समी. (ii), (iii), (iv) का मान समी. (i) में रखने पर

$$C_{A0}\left(\frac{dX_A}{dt}\right) = k_1[C_{A0}(1-X_A)] - k_2[C_{A0}(M+X_A)]$$

$$\frac{dX_A}{dt} = k_1(1-X_A) - k_2(M+X_A) \quad \text{—— (v)}$$

$$K_c = \frac{k_1}{k_2} = \frac{C_{Re}}{C_{Ae}}$$

$$C_A = C_{A0}(1-X_A)$$
$$C_R = C_{A0}(M+X_A)$$
$$C_{Ae} = C_{A0}(1-X_{Ae})$$
$$C_{Re} = C_{A0}(M+X_{Ae})$$

$$\frac{k_1}{k_2} = \frac{C_{A0}(M+X_{Ae})}{C_{A0}(1-X_{Ae})}$$

$$\frac{k_1}{k_2} = \frac{(M+X_{Ae})}{(1-X_{Ae})}$$

$$k_2 = k_1\frac{(1-X_{Ae})}{(M+X_{Ae})} \quad \text{—— (vi)}$$

$$\frac{dX_A}{dt} = k_1(1-X_A) - \frac{k_1(1-X_{Ae})(M+X_A)}{(M+X_{Ae})}$$

$$\frac{dX_A}{dt} = k_1\left[\frac{(1-X_A)(M+X_{Ae}) - (1-X_{Ae})(M+X_A)}{(M+X_{Ae})}\right]$$

$$\frac{dX_A}{dt} = k_1\left[\frac{(M - MX_A + X_{Ae} - \cancel{X_A X_{Ae}}) - (M - MX_{Ae} + X_A - \cancel{X_A X_{Ae}})}{(M+X_{Ae})}\right]$$

$$\frac{dX_A}{dt} = \frac{k_1}{M+X_{Ae}}\left[(X_{Ae} - X_A) + M(X_{Ae} - X_A)\right]$$

$$\frac{dX_A}{dt} = \frac{k_1(M+1)}{(M+X_{Ae})}(X_{Ae} - X_A) = k_1\left[\frac{(X_{Ae} + MX_{Ae}) + (X_A - MX_A)}{(M+X_{Ae})}\right]$$

$$\frac{dX_A}{dt} = \frac{k_1}{M+X_{Ae}}\left[X_{Ae}(M+1) - X_A(M+1)\right]$$

$$\frac{dX_A}{dt} = \frac{k_1(M+1)}{M+X_{Ae}}(X_{Ae} - X_A)$$

$$\frac{dX_A}{(X_{Ae} - X_A)} = \frac{k_1(M+1)}{(M+X_{Ae})}\,dt$$

$$\int_0^{X_A}\frac{dX_A}{X_{Ae} - X_A} = \frac{k_1(M+1)}{(M+X_{Ae})}\int_0^t dt$$

$$\left[-\ln(X_{Ae} - X_A)\right]_0^{X_A} = \frac{k_1(M+1)}{(M+X_{Ae})}\left[t\right]_0^t$$

$$\left[-\ln(X_{Ae} - X_A) - \ln X_{Ae}\right] = \frac{k_1(M+1)}{(M+X_{Ae})}\,t$$

$$-\ln\left\{\frac{X_{Ae} - X_A}{X_{Ae}}\right\} = \frac{k_1(M+1)}{(M+X_{Ae})}\,t$$

$$\boxed{-\ln\left[1 - \frac{X_A}{X_{Ae}}\right] = \frac{k_1(M+1)}{(M+X_{Ae})}\,t}$$

Rate eqn for first order reversible ch. reaction.

(iii) Rate expression for Second order reversible ch. reaction $A+B \rightleftharpoons R+S$

C_{A0} = Conc of Reactant A at time $t=0$
C_{B0} = Conc of Reactant B at time $t=0$
C_A, C_B = Conc of Reactant A and B at time $t=t$
$C_{R0} = 0, C_{S0} = 0$ Conc of Reactant R, S at time $t=0$
C_R, C_S = Conc of Reactant R, S at time $t=t$
C_{Ae}, C_{Be} = Conc of Reactant A and B at equilibrium
C_{Re}, C_{Se} = Conc of Reactant R and S at equilibrium
X_A = fractional Conversion of Reactant A at time $t=t$
X_{Ae} = fractional Conversion of Reactant A at equilibrium
k_1 = Second order rate Constant for forward ch. reaction
k_2 = Second order rate Constant for Backward ch. reaction
k_c = equilibrium Constant $= k_1/k_2$

let $C_{A0} = C_{B0}$ $\quad C_{R0} = 0 \quad C_{S0} = 0$

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k_1 C_A C_B - k_2 C_R C_S \quad \text{—(i)}$$

$$X_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}$$

$$C_{A0} - C_A = C_{A0} X_A$$

$$C_A = C_{A0}(1 - X_A) \quad \text{—(ii)}$$

अवकलन करने पर

$$\frac{dC_A}{dt} = -C_{A0}\left(\frac{dX_A}{dt}\right) \quad \text{—(iii)}$$

$$A + B \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} R + S$$

$t=0$	C_{A0}	C_{B0}	C_{R0}	C_{S0}
$t=t$	C_A	C_B	C_R	C_S

$$C_{A0} - C_A = C_{Be} - C_B$$

$$C_{A0} - C_A = C_{Ae} - C_B$$

$C_{A0} X_A$

$$C_{Be} = C_{Ae}$$

$$C_B = C_{A0}(1 - X_A) \quad \text{— (iv)}$$

$$\cancel{C_{A0} - C_B = C_{A0} - C_A} \qquad C_B - C_{B0} = C_{Ae} - C_A$$

$$\cancel{C_{Be} - C_A = C_{A0} X_A} \qquad C_B - C_{B0} = C_{Ae} X_A$$

$$\cancel{C_{B0}} \qquad C_B = C_{Ae} + C_{Ae} X_A$$

$$C_B = C_{Ae} X_A \quad \text{— (v)}$$

$$C_S - C_{S0} = C_{Ae} - C_A$$

$$C_S - C_{S0} = C_{A0} X_A$$

$$C_S = C_{S0} + C_{Ae} X_A$$

$$C_S = C_{Ae} X_A \quad \text{— (vi)}$$

$$\cancel{C_{A0}} \frac{dX_A}{dt} = k_1 \cancel{C_{A0}} (1 - X_A)^2 \times \cancel{C_{A0}} (1 - X_A) - k_2 \cancel{C_{A0}} X_A \times C_{Ae} X_A$$

$$\cancel{C_{A0}} \frac{dX_A}{dt} = k_1 C_{Ae}^2 (1 - X_A)^2 - k_2 C_{Ae}^2 X_A^2$$

$$\frac{dX_A}{dt} = k_1 C_{Ae} (1 - X_A)^2 - k_2 C_{Ae} X_A^2$$

$$\frac{dX_A}{dt} = C_{Ae} \left(k_1 (1 - X_A)^2 - k_2 X_A^2 \right) \quad \text{— (vii)}$$

$$K_c = \frac{C_{Se} C_{Se}}{C_{Ae} C_{Be}}$$

$$C_{Ae} = C_{A0} (1 - X_{Ae})$$

$$C_{Be} = C_{Ae} (1 - X_{Ae})$$

$$C_{Ae} = \cancel{C_{A0} (1 - X_A)} \; C_{Ae} X_{Ae}$$

$$C_{Se} = C_{Ae} X_{Ae}$$

$$K_c = \frac{(C_{Ae} X_{Ae})(C_{Ae} X_{Ae})}{C_{A0}(1 - X_{Ae}) C_{Ae} (1 - X_{Ae})}$$

$$k_c = \frac{X_{Ae}^2}{(1-X_{Ae})^2}$$

$$k_c = \frac{k_1}{k_2} \qquad \frac{k_1}{k_2} = \frac{X_{Ae}^2}{(1-X_{Ae})^2}$$

$$k_2 = \frac{k_1(1-X_{Ae})^2}{X_{Ae}^2}$$

eq. (7) से

$$\frac{dX_A}{dt} = C_{A0}\left[k_1(1-X_A)^2 - k_2 X_A^2\right] \quad \text{— (viii)}$$

$$\frac{dX_A}{dt} = C_{A0}\left[k_1(1-X_A)^2 - \frac{k_1(1-X_{Ae})^2}{X_{Ae}^2} \times X_A^2\right]$$

$$\frac{dX_A}{dt} = k_1 C_{A0}\left[\frac{(1-X_A)^2}{1} - \frac{(1-X_{Ae})^2}{X_{Ae}^2} \times X_A^2\right]$$

$$\frac{dX_A}{dt} = k_1 C_{A0}\left[\frac{\underbrace{(1-X_A)^2}_{a} X_{Ae}^2 - \underbrace{(1-X_{Ae})^2}_{b} X_A^2}{X_{Ae}^2}\right] \qquad a^2 - b^2 = (a+b)(a-b)$$

$$\frac{dX_A}{dt} = \frac{k_1 C_{A0}}{X_{Ae}^2}\left[\{(X_{Ae} - X_A X_{Ae}) + (X_A - X_A X_{Ae})\}\{X_{Ae} - X_A X_{Ae} - X_A + X_{Ae} X_A\}\right]$$

$$\frac{dX_A}{dt} = \frac{k_1 C_{A0}}{X_{Ae}^2}\left[\{X_{Ae}(1-X_A) + (1-X_{Ae})X_A][X_{Ae}(1-X_A) - (1-X_{Ae})X_A]\}\right]$$

$$\frac{dX_A}{dt} = \frac{k_1 C_{A0}}{X_{Ae}^2}\left[(X_{Ae} - X_A X_{Ae}) + (X_A - X_{Ae} - X_A X_{Ae})(X_{Ae} - X_A X_{Ae}) - (X_A + X_{Ae} X_A)\right]$$

$$\frac{dX_A}{dt} = \frac{k_1 C_{A0}}{X_{Ae}^2}\left[[X_A + X_{Ae} - 2X_A X_{Ae}][X_{Ae} - X_A]\right]$$

$$\frac{dX_A}{dt} = \frac{k_1 C_{A0}}{X_{Ae}^2}\left[\left\{X_{Ae} + X_A(1-2X_{Ae})\right\}\left[X_{Ae} - X_A\right]\right]$$

$$\frac{dX_A}{[X_{Ae} + X_A(1-2X_{Ae})][X_{Ae} - X_A]} = \frac{k_1 C_{A0}}{X_{Ae}^2}\, dt$$

$$\int_0^{X_A} \frac{dX_A}{[X_{Ae} + X_A(1-2X_{Ae})][X_{Ae} - X_A]} = \frac{k_1 C_{A0}}{X_{Ae}^2}\int_0^t dt$$

$$\int_0^{X_A} \frac{dX_A}{[X_{Ae} + X_A(1-2X_{Ae})][X_{Ae} - X_A]} = \frac{k_1 C_{A0}}{X_{Ae}^2}\, t$$

On breaking In partial fraction

$$\frac{1}{\{X_{Ae} - X_A\}[X_{Ae} + X_A(1-2X_{Ae})]} = \frac{a}{(X_{Ae} - X_A)} + \frac{b}{X_{Ae} + X_A(1-2X_{Ae})}$$

$$\frac{1}{\{X_{Ae} - X_A\}[X_{Ae} + X_A(1-2X_{Ae})]} = \frac{a(X_{Ae} + X_A(1-2X_{Ae}) + b(X_{Ae} - X_A)}{(X_{Ae} - X_A)[X_{Ae} + X_A(1-2X_{Ae})]}$$

$$1 = a\{X_{Ae} + X_A(1-2X_{Ae}) + b(X_{Ae} - X_A)\}$$

$$1 = aX_{Ae} + aX_A(1-2X_{Ae}) + bX_{Ae} - bX_A$$

$$1 = (a+b)X_{Ae} + X_A[a(1-2X_{Ae}) - b]$$

$$1 = (a+b)X_{Ae} \quad (5)$$

$$0 = a(1-2X_{Ae}) - b \quad \Big/ \quad b = a(1-2X_{Ae})$$

$$a + b = \frac{1}{X_{Ae}}$$

$$a + a(1-2X_{Ae}) = \frac{1}{X_{Ae}}$$

$$2a - 2aX_{Ae} = \frac{1}{X_{Ae}}$$

$$2a(1 - X_{Ae}) = \frac{1}{X_{Ae}}$$

$$a = \frac{1}{2X_{Ae}(1 - X_{Ae})}$$

$$b = \frac{1}{2X_{Ae}(1 - X_{Ae})}(1 - 2X_{Ae})$$

$$\int_0^{X_A} \frac{a}{X_{Ae} - X_A}\, dX_A + \int_0^{X_A} \frac{b}{\{X_{Ae} + X_A(1-2)X_{Ae}\}} = \frac{k_1 C_{A0}}{X_{Ae}^2} t$$

$$\frac{1}{2X_{Ae}(1-X_{Ae})} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{X_{Ae} - X_A} + \frac{(1-2X_{Ae})}{2X_{Ae}(1-X_{Ae})} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{X_{Ae} + X_A(1-2)X_{Ae}} = \frac{k_1 C_{A0}}{X_{Ae}^2} t$$

$$\frac{1}{2X_{Ae}(1-X_{Ae})} \left[-\ln(X_{Ae} - X_A)\right]_0^{X_A} + \frac{\cancel{(1-2X_{Ae})}}{2X_{Ae}(1-X_{Ae})} \times \frac{1}{\cancel{(1-2X_{Ae})}} \left[\ln X_{Ae} + X_A(1-2)X_{Ae}\right]$$

$$= \frac{k_1 C_{A0}}{X_{Ae}^2} t$$

$$\frac{1}{2X_{Ae}(1-X_{Ae})} \left[-\ln(X_{Ae} - X_A)\right]_0^{X_A} + \frac{1}{2X_{Ae}(1-X_{Ae})} \ln\left[X_{Ae} + X_A(1-2)X_{Ae}\right]_0^{X_A} = \frac{k_1 C_{A0}}{X_{Ae}^2} t$$

$$\frac{1}{2X_{Ae}(1-X_{Ae})} \left[-\ln(X_{Ae} - X_A)\right]_0^{X_A} + \left[\ln(X_{Ae} + X_A(1-2)X_{Ae})\right]_0^{X_A} = \frac{k_1 C_{A0}}{X_{Ae}^2} t$$

$$\frac{1}{2X_{Ae}(1-X_{Ae})} \Big[-\ln(X_{Ae} - X_A) + \cancel{\ln X_{Ae}} + \ln[X_{Ae} + X_A(1-2X_{Ae}) - \cancel{\ln X_{Ae}}$$

$$= \frac{k_1 C_{A0}}{X_{Ae}^2} t$$

$$\frac{1}{2X_{Ae}(1-X_{Ae})}\left[\frac{\ln X_{Ae}+X_A(1-2X_{Ae})}{(X_{Ae}-X_A)}\right] = \frac{k_1 C_{A0}}{X_{Ae}^2} \times t$$

$$\ln\left[\left\{\frac{X_{Ae}+X_A(1-2X_{Ae})}{(X_{Ae}-X_A)}\right\}\right] = \frac{k_1 C_{A0}}{X_{Ae}^{\cancel{2}}}\, t\, \cancel{2}\cancel{X_{Ae}}(1-X_{Ae})$$

$$\ln\left[\left\{\frac{X_{Ae}+X_A(1-2X_{Ae})}{(X_{Ae}-X_A)}\right\}\right] = \frac{2k_1 C_{A0} t}{X_{Ae}}(1-X_{Ae})$$

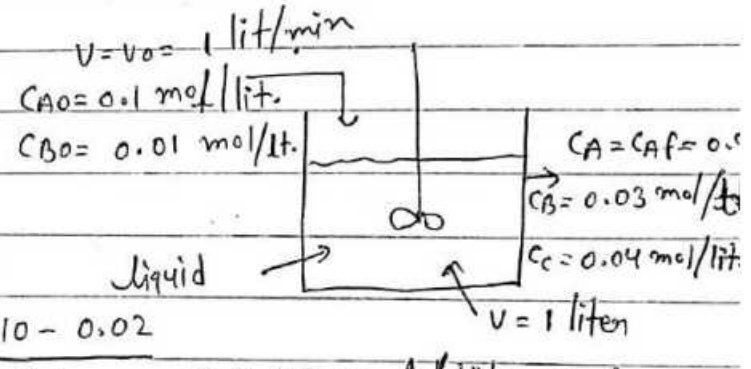
$$\ln\left\{\frac{X_{Ae}+X_A(1-2X_{Ae})}{(X_{Ae}-X_A)}\right\} = 2k_1 C_{A0} t\left(\frac{1}{X_{Ae}}-1\right)$$

2018

Q1. One liter per minute of liquid containing A and B ($C_{A0} = 0.10$ mol/litre, $C_{B0} = 0.01$ mol/liter). flow into a mixed reactor of volume $v = 1$ liter. The materials react in a complex manner for which the stoichiometry is unknown. The outlet stream from the reactor contains A, B and C ($C_{Af} = 0.02$ mol/liter, $C_{Bf} = 0.03$ mol/liter, $C_{Cf} = 0.04$ mol/li
. Find the rate of reaction of A, B, and C for the conditions within the reactor.

Ans.

for a liquid in a mixed flow reactor $\varepsilon_A = 0$ and



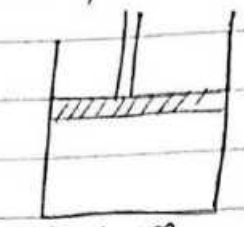
$$-r_A = \frac{C_{A0} - C_A}{\tau} = \frac{C_{A0} - C_A}{V/v} = \frac{0.10 - 0.02}{1/1} = 0.08 \text{ mol/liter} \times \text{min.}$$

$$-r_B = \frac{C_{B0} - C_B}{\tau} = \frac{0.01 - 0.03}{1} = -0.02 \text{ mol/liter} \times \text{min.}$$

$$-r_C = \frac{C_{C0} - C_C}{\tau} = \frac{0 - 0.04}{1} = -0.04 \text{ mol/liter} \times \text{min}$$

Thus A is disappearing while B and C being formed

Design eq^n for variable volume batch reactor



$aA \rightarrow rR$

Consider A chemical reaction $aA \rightarrow rR$ taking place in A variable volume batch reactor

$$-r_A = -\frac{1}{V}\left(\frac{dN_A}{dt}\right) = kC_A^n \quad \text{--- (i)}$$

fractional Conversion of reactant A

$$X_A = \frac{N_{A0} - N_A}{N_{A0}}$$

$$N_{A0}X_A = N_{A0} - N_A$$

$$N_A = N_{A0} - N_{A0}X_A$$

$$N_A = N_{A0}(1 - X_A) \quad \text{--- (ii)}$$

$$\frac{dN_A}{dt} = -N_{A0}\frac{dX_A}{dt}$$

$$\varepsilon_A = \frac{V/_{X_A=1} - V/_{X_A=0}}{V/_{X_A=0}}$$

$$\varepsilon_A X_A = \frac{V - V_0}{V_0}$$

$$V - V_0 = V_0\varepsilon_A X_A$$

$$V = V_0 + V_0\varepsilon_A X_A$$

$$V = V_0(1 + \varepsilon_A X_A) \quad \text{--- (iii)}$$

$$N_A = N_{A0}(1 - X_A)$$

$$\cancel{C_A = C_{A0}(1-X_A)} \qquad C_A = \frac{N_A}{V}$$

$$C_A = \frac{N_{A0}(1 - X_A)}{V_0(1 + \varepsilon_A X_A)}$$

$$C_A = \frac{C_{A0}(1 - X_A)}{(1 + \varepsilon_A X_A)} \quad \text{--- (iv)}$$

$$-r_A = -\frac{1}{V}\left(\frac{dN_A}{dt}\right) = kC_A^n$$

$$\frac{dN_A}{dt} = -N_{A0}\frac{dX_A}{dt}$$

$$\frac{N_{A0}}{V^0(1+\varepsilon_A X_A)} \frac{dX_A}{dt} = k \frac{C_{A0}^n (1-X_A)^n}{(1+\varepsilon_A X_A)^n}$$

$$\frac{C_{A0}}{(1+\varepsilon_A X_A)} \frac{dX_A}{dt} = \frac{k C_{A0}^n (1-X_A)^n}{(1+\varepsilon_A X_A)^n}$$

$$\frac{dX_A}{dt} = \frac{k C_{A0}^{n-1} (1-X_A)^n}{(1+\varepsilon_A X_A)^{n-1}}$$

$$k C_{A0}^{n-1} dt = \frac{(1+\varepsilon_A X_A)^{n-1}}{(1-X_A)^n} dX_A$$

$$k C_{A0}^{n-1} \int_0^t dt = \int_0^{X_A} \frac{(1+\varepsilon_A X_A)^{n-1}}{(1-X_A)^n} dX_A$$

$$k C_{A0}^{n-1} t = \int_0^{X_A} \frac{(1+\varepsilon_A X_A)^{n-1}}{(1-X_A)^n} dX_A$$

$$t = \frac{1}{k C_{A0}^{n-1}} \int_0^{X_A} \frac{(1+\varepsilon_A X_A)^{n-1}}{(1-X_A)^n} dX_A$$

2013

Q1. A certain reaction has a rate given by $-r_A = 0.005 C_A^2$ mol/cm minute. If the conc is to be expressed in mol/litre and time in hour, what would be the value and unit of rate constant?

Ans.

we know that $-r_{AB} = -\frac{1}{V}\frac{dN_A}{dt} = KC_A^n$

$$-\text{rate} = K[C_A]$$

$$K = \frac{-\text{rate}}{[C_A]}$$

According to question

$$K = \frac{-\text{rate}}{[C_A]^2}$$

$$-r_A = 0.005 C_A^2 \ \text{mol/cm}^3 \times \text{minute}$$

unit of rate constant for Second order

$$K = \frac{-r_A}{[C_A]^2} = \frac{\text{litre}}{\text{mol} \times \text{Sec.}}$$

1 litre = 1000 cm^3 , 1 hr = 60 min

1 cm^3 = $\frac{1}{1000}$ litre 1 min = $\frac{1}{60}$ hr.

$$K = \frac{0.005 \times 0.001}{0.0167}$$

$$K = 0.000299 \ \frac{L}{\text{Mol} \times \text{hr}} = \text{mol}^{-1} \times \text{litre} \times \text{hr}^{-1}$$

Reversible Reaction	Irreversible reaction
1. वह Reaction जो दोनों ~~दिशाओं~~ दिशा में होती है, Reversible Reaction कहलाती है।	1. वह Reaction जो एक ही दिशा में होती है, Irreversible Reaction कहलाती है।
2. इस Reaction में reactant पूरी तरह product में Convert नहीं होते है।	2. इस Reaction में Reactant पूरी तरह product में Convert हो जाते है
3. यह slow होती है।	3. यह fast reaction होती है।
4. यह Reaction Complete नहीं होती है।	4. यह Reaction Complete हो जाती है
5. यह reaction दोनों तरफ से start हो सकती है।	5. यह Reaction सिर्फ Reactant की ओर से ही start होती है।
6. It Attains equilibrium	6. Equilibrium is not attained
7. Ex:⇒ $N_2 + 3H_2 \rightleftharpoons 2NH_3$ $N_2 + O_2 \rightleftharpoons 2NO$	7. Ex.⇒ $2Na + Cl_2 \rightarrow 2NaCl$ $2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O$

Difference between homogeneous reaction and hetrogeneous reaction

homogeneous reaction	hetrogeneous reaction
1. वह chemical reaction जिसमें reactant व product एक ही अवस्था में उपस्थित रहते हैं। homogeneous reaction कहलाती है।	1. वह chemical reaction जिसमें reactant व product दो या दो से अधिक अवस्था में उपस्थित रहते हैं उसे hetrogeneous reaction कहते हैं।
2. इस प्रकार की reaction में reaction mixture में reactant की Composition एक समान रहती है। ~~अतिए इसे Uniformity reaction~~ भी कहते हैं।	2. इस प्रकार की reaction में reaction mixture में reactant की Composition एक समान नहीं होती है ~~इसलिए इसे~~ ~~Non~~
3. यह reaction nature में Simple होती है।	3. यह reaction nature में Complex होती है।
4. homogeneous reaction केवल Reactants के बीच परस्पर क्रिया की प्रकृति पर निर्भर करती है।	4. hetrogeneous reaction Reactant के ~~product~~ साथ - साथ product के बीच परस्पर क्रिया की प्रकृति पर निर्भर करते हैं।
ex ⇒ $H_2 + Cl_2 \rightarrow 2HCl$	ex ⇒ $C + O_2 \rightarrow CO_2$

difference between CSTR and PFR

CSTR	PFR
1. CSTR में PFR की तुलना में समान आयतन पर कम Conversion प्राप्त होता है।	इस reactor में CSTR की तुलना में समान आयतन पर अधिक Conversion प्राप्त होता है।
2. CSTR में reactant की Conc प्रत्येक बिंदु समान रहती है।	2. PFR में reactant की Conc प्रत्येक बिंदु पर अलग - अलग रहती है।
3. CSTR में average Rate of Reaction का मान कम रहता है।	3. PFR में average Rate of Reaction का मान अधिक रहता है।
4. इसमें mixing के लिए एक agitator का use किया जाता है।	4. इसमें mixing के लिए कोई agitator का use नहीं किया जाता है।
5. इसमें well-mixed nature के कारण efficient heat transfer and temp. Control होता है।	5. इसमें heat transfer व temp. Control difficult होता है।

अठासी पिचानवे

difference between single and multiple reaction

Single reaction	Multiple reaction
1. वह Reactions जिनकी progress को एक ही stoichiometry expression से show करते है	1. वह Reactions जिनकी progress को दो या दो से अधिक stoichiometry expression से show करते है।
2. यह Simple reaction होती है।	2. यह Complex reaction होती है।
3. यह reaction single step में Complete हो जाती है।	3. यह reaction multiple steps में Complete होती है।
4. इसमें कोई intermediate product प्राप्त नहीं होता है।	4. इसमें intermediate product प्राप्त होते है।
5. यह reaction product को fast produce करती है।	5. take More time
6. straight forward path	6. Multiple path
7. ex ⇒ $S + O_2 \rightarrow SO_2$	~~7. ex ⇒ $n(CH_2=CH_2) \rightarrow (CH_2-CH_2)_n$~~ 7. ex ⇒ $CH \equiv CH + H_2 \rightarrow CH_2 = CH_2$ $CH_2 = CH_2 + H_2 \rightarrow CH_3 - CH_3$

Hildenbrandt Extractor :- यहाँ पर एक hildenbrandt Extractor दिखाया गया है। जिसका use feed में उपस्थित Solute को Solvent की सहायता से extract करने के लिए किया जाता है। इसमें U-shaped Screw Conveyor का use किया जाता है। जिसमें दोनों ओर प्रत्येक तरफ एक vertical Screw Conveyor का use किया जाता है। तथा एक horizontal Screw Conveyor का भी use किया जाता है। यह Screw Conveyor different Speed से turn करते है। यह Screw Conveyor perforated होते है। जिससे इनमें से solvent pass हो सके। ~~Soli~~ feed को hildenbrandt Extractor के एक सिरे enter कराया जाता है तथा fresh solvent को दूसरे से सिरे enter किया जाता है। ~~क्योंकि~~ जिससे feed व Solvent दोनों Counter Current दिशा में flow होते। Rich Extract को left सिरे के top से बाहर निकाल लिया जाता है तथा leached solid को दूसरे सिरे बाहर निकाल लिया जाता है।