

## 反応工学

以下の文章を読み、設問に答えよ。なお、解答する際には導出過程を示し、数値の場合は有効数字を3桁とせよ。

【問1】以下の反応式で示されるアンモニアの合成反応



が定温・定圧に保たれた流通式反応器で進行する。 $\text{H}_2$ と $\text{N}_2$ のモル比を1.00とした混合ガスを、700 K, 1.80 MPaで反応器に供給する。成分はすべて理想気体とみなすことができ、反応熱の影響は無視できる。気体定数は、 $R = 8.31 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$ である。

- 1) 反応器入口での供給ガス中の各成分濃度 $[\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}]$ を求めよ。
- 2) 限定成分が完全に反応した際の全物質量の増加率 $\varepsilon$ を求めよ。
- 3) 反応器出口での $\text{H}_2$ の反応率が70.0%となる場合の流出ガス中の $\text{H}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{NH}_3$ の各成分濃度 $[\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}]$ を求めよ。

【問2】図1に示すように、体積 $V[\text{m}^3]$ の管型反応器の出口流体の一部を、反応器入口側の合流点Iに戻して新鮮な原料と混ぜることを考える。新鮮な原料の供給流量を $v_T[\text{m}^3\cdot\text{s}^{-1}]$ 、反応成分Aの濃度を $C_{A0}[\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}]$ 、リサイクル流量比を $R[-]$ ( $\equiv$ リサイクル流体の流量/ $v_T$ )とし、合流点Iでの成分Aの濃度を $C_{Ai}[\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}]$ 、リサイクル分岐点F後の出口での成分Aの濃度と総括反応率を、それぞれ $C_{Af}[\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}]$ 、 $x_{Af}[-]$ ( $\equiv(C_{A0} - C_{Af})/C_{A0}$ )とする。

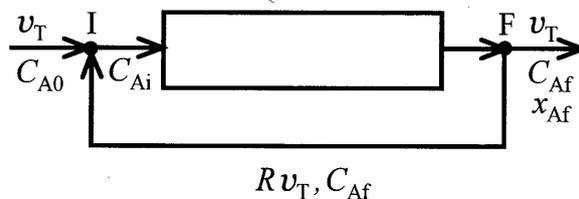


図1 リサイクル管型反応器

反応器入口の合流点 I でのリサイクル流体の混合前後の成分 A の物質収支を考えると、次式を得る。

$$v_T C_{A0} + \boxed{\text{ア}} C_{Af} = \boxed{\text{イ}} C_{Ai} \quad (1)$$

この式を  $C_{Ai}$  について整理すると、次式を得る。

$$C_{Ai} = \frac{C_{A0} + \boxed{\text{ウ}} C_{Af}}{\boxed{\text{エ}}} \quad (2)$$

ここで、リサイクル流体の混合を考慮した反応率を  $x_{Ar}[-]$  と定義し、式(2)と反応率  $x_{Af}[-]$  を用いて整理すると、次式を得る。

$$x_{Ar} \equiv \frac{C_{Ai} - C_{Af}}{C_{Ai}} = \frac{x_{Af}}{\boxed{\text{オ}}} \quad (3)$$

また、リサイクル流体の混合を考慮した空間時間を  $\tau_r[s]$  と定義し、リサイクルがない場合の空間時間  $\tau(=V/v_T)[s]$  を用いて整理すると、次式を得る。

$$\tau_r \equiv \frac{V}{v_T + Rv_T} = \frac{\tau}{1+R} \quad (4)$$

液相不可逆一次反応を考えると、反応速度は  $r_A = -kC_A$  ( $k [s^{-1}]$  は反応速度定数) となり、管型反応器の設計方程式として次式を得る。

$$\tau_r = -\frac{\ln(1-x_{Ar})}{k} \quad (5)$$

この式に、式(3)、(4)を代入して整理すると、次式を得る。

$$x_{Af} = \frac{1 - \boxed{\text{カ}}}{1 - \frac{R}{1+R} \boxed{\text{カ}}} \quad (6)$$

- 1) 空欄  $\boxed{\text{ア}}$  ~  $\boxed{\text{カ}}$  に入る適切な文字式を答えよ。
- 2) 反応器の体積  $V=3.00 \text{ m}^3$ 、新鮮な原料の供給流量  $v_T = 6.00 \times 10^{-2} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ 、反応速度定数  $k = 3.00 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$  である。リサイクル流量比  $R = 2.00$  の場合の総括反応率  $x_{Af}$  を求めよ。
- 3) 設問 2) と同じ条件で、総括反応率  $x_{Af} = 0.750$  となるリサイクル流量比  $R$  を求めよ。ただし、 $R$  の有効数字は 1 桁でよい。
- 4) 流量比  $R=0$  と  $R = \infty$  の場合の設計方程式は、それぞれある理想反応器の式と一致する。各条件での理想反応器の名称を用いて、リサイクル反応器の特徴を述べよ。