

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Kedua
Sidang Akademik 1996/97

April 1997

EKC 260 - Kejuruteraan Tindakbalas Kimia

Masa: [3 jam]

ARAHAN KEPADA CALON:

Sila pastikan kertas soalan ini mengandungi **SEMBILAN (9)** mukasurat bercetak dan **SATU (1)** lampiran sebelum anda memulakan peperiksaan.

Kertas soalan ini mengandungi **LIMA (5)** soalan.

Jawab mana-mana **TIGA (3)** soalan dari **Bahagian A**. Soalan **No. 5** dari **Bahagian B** adalah **diwajibkan**.

Anda **diwajibkan** menjawab Soalan No. 5 dalam **Bahasa Malaysia**.

Soalan terjemahan Bahasa Inggeris ditaip dalam bentuk tulisan **Italic**.

BAHAGIAN A

1. [a] Data berikut dilaporkan untuk penguraian dimetil eter dalam fasa gas pada isipadu malar di dalam reaktor berkelompok. Pada permulaannya, hanya $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ hadir.

The following data were reported for a gas phase constant volume decomposition of dimethyl ether at 504°C in a batch reactor. Initially, only $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ was present

Masa (s)	0	390	777	1195	3155	∞
Jumlah tekanan (Total Pressure) (mm) Hg	312	408	488	562	799	931

Anggapkan tindakbalas
Assuming that the reaction



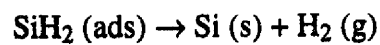
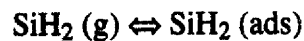
adalah tidak berbalik dan mencapai penghabisan, tentukan **tertib tindakbalas** dan **pemalar kadar tindakbalas k**.

is irreversible and goes to completion, determine the reaction order and reaction rate constant k.

(15 markah)

- [b] Pengendapan Wap Kimia (CVD) digunakan untuk membentuk filem nipis yang stabil untuk silikon berpolihablur dan bahan-bahan lain seperti bahan ingatan pensemikonduksi, transistor, dan pemikroproses. Pertimbangkan pengendapan silikon dari SiH_4 . Turutan tindakbalas adalah:

Chemical Vapor Deposition (CVD) is used to grow stable thin films of polycrystalline silicon and other materials (chips) for uses such as semi conductor memories, transistors and micro processors. Consider the deposition of silicon from SiH₄. The reaction sequence is:



Tindakbalas ini dirintangi oleh H₂, bertertib pertama terhadap SiH₄ pada kepekatan SiH₄ yang rendah, bertertib sifar terhadap SiH₄ pada kepekatan SiH₄ yang tinggi.

The reaction rate is inhibited by H₂, first order in SiH₄ at low SiH₄ concentrations, and zero order in SiH₄ at high concentrations.

Bangunkan satu mekanisme dan langkah penghad kadar yang sesuai dengan pemerhatian-pemerhatian ini.

Develop a mechanism and rate limiting step consistent with these observations.

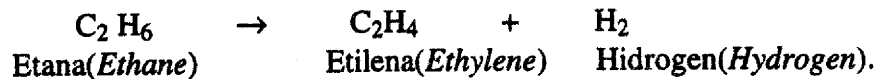
(10 markah)

2. [a] Etilena merupakan salah satu bahan petrokimia yang penting yang dihasilkan dari pemecahan aliran suapan etana tulen. 70% dari etilena yang dihasilkan, digunakan untuk penghasilan polietylena, iaitu bahan plastik yang penting, 20% untuk etilena oksida dan etilena glikol, 5% untuk gentian, dan 5% untuk pelarut. Pemecahan etana dijalankan dalam reaktor aliran penyumbat beroperasi secara isoterma pada 1200K dan tekanan 10 atm.

Ethylene being one of the important petrochemical is produced from cracking a feed stream of pure ethane. 70% of the ethylene produced is used in the manufacture of polyethylene, an important plastics material, 20% for ethylene oxide and ethylene glycol, 5% for fibres and 5% for solvents. Cracking of ethane is carried out in a plug flow reactor operating isothermally at 1200K and a pressure of 10 atm.

Tentukan isipadu reaktor aliran penyumbat yang diperlukan untuk mengeluarkan 100 juta Kg etilena setahun dari pemecahan aliran suapan etana tulen. Tindakbalas adalah seperti berikut:

Determine the volume of plug flow reactor necessary to produce 100 million kg of ethylene a year from cracking a feed stream of pure ethane. The reaction is represented as:



Tindakbalas ini tidak berbalik dan adalah tindakbalas asas. Penukaran etana dikehendaki mencapai 80% di dalam keadaan operasi.

The reaction is irreversible and elementary. It is desired to achieve 80% conversion of ethane under operating conditions.

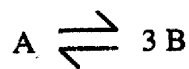
$$\begin{array}{l} \text{Pemalar kadar tindakbalas } k \text{ pada } 1200\text{K} = 69.9 \text{ saat}^{-1} \\ \text{Reaction rate constant } k \text{ at } 1200\text{K} = 69.9 \text{ sec}^{-1} \end{array}$$

Turunan tekanan dalam reaktor boleh diabaikan.
The pressure drop across the reactor is negligible.

(10 markah)

[b] Tindakbalas asas fasa gas:

The elementary gas phase reaction



dijalankan dalam reaktor aliran. Kadar tindakbalas spesifik pada 127°C ialah 0.044 min⁻¹. Bahan tulen A memasuki reaktor pada 10 atm dan 127°C dan kadar aliran molar 2.5 mol/min. Anggapkan tindakbalas ini berbalik dengan $K_e = 2 \text{ mole}^2/\text{dm}^6$. Kirakan:

is carried out in a flow reactor. The specific reaction rate at 127°C is 0.0442 min⁻¹. Pure A enters the reactor at 10 atm and 127°C and a molar flow rate of 2.5 mole/min. Assume the reaction is reversible with $K_e = 2 \text{ mole}^2/\text{dm}^6$. Calculate;

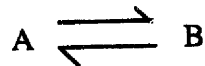
- (i) Penukaran pada keseimbangan
the equilibrium conversion
- (ii) Isipadu **CSTR** untuk mencapai penukaran pada 90% dari nilai penukaran pada keseimbangan.

*the volume of **CSTR** to achieve a conversion that is 90% of the equilibrium value.*

(15 markah)

3. Tindakbalas asas berbalik:

The reversible elementary reaction



dijalankan di dalam CSTR. Plotkan kelok haba yang dihasilkan dan haba yang dikeluarkan dalam graf yang sama. Berapa banyakkah keadaan mantap berganda yang terdapat dan apakah nilai-nilainya?

is carried out in a CSTR. Plot the heat generated and heat removed curves on the same graph. How many multiple steady states are there and what are their values?

Data tambahan:

Additional data:

$$\Delta H_R^\circ = -80 \frac{\text{kJ}}{\text{mol A}}, \quad F_{A_0} = 10 \frac{\text{mol}}{\text{s}}, \quad C_{A_0} = 2 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$

$$UA = 2000 \frac{\text{J}}{\text{K.s}}$$

$$V = 500 \text{ dm}^3$$

$$T_a = 40^\circ\text{C}$$

$$k = 0.001 \text{ s}^{-1} \text{ at } 373\text{K}$$

$$C_{P_A} = C_{P_B} = 40 \text{ J/mol.K}$$

$$E = 150 \text{ kJ/mol}$$

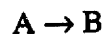
$$T_o = 27^\circ\text{C}$$

$$K_{eq} = 100 \exp \left[9267 \left(\frac{1}{350} - \frac{1}{T} \right) \right]$$

(25 markah)

4. [a] Tindakbalas tidak berbalik heterogen bertertib pertama berlaku di dalam intil mangkin berbentuk sfera yang diliputi oleh platinum. Kepekatan bahan tindakbalas pada separuh jarak antara permukaan luar dan bahagian tengah intil (i.e. $r = R/2$) adalah sama dengan 1/10 kepekatan pada permukaan luar. Kepekatan pada permukaan luar ialah 0.001 g mol/dm^3 , garispusat ($2R$) ialah $2 \times 10^{-3} \text{ cm}$ dan pekali pembauran ialah $0.1 \text{ cm}^2/\text{s}$.

A first order heterogeneous irreversible reaction is taking place within a spherical catalyst pellet which is plated with platinum throughout the pellet. The reactant concentration halfway between the external surface and the center of the pellet (i.e. $r = R/2$) is equal to 1/10 the concentration at the external surface. The concentration at the external surface is 0.001 g mol/dm^3 , the diameter ($2R$) is $2 \times 10^{-3} \text{ cm}$ and the diffusion coefficient is $0.1 \text{ cm}^2/\text{s}$.



Berapakah garispusat intil itu perlu dikurangkan jika faktor keberkesanan ialah 0.8?

To what diameter should the pellet be, reduced if the effectiveness factor is to be 0.8?

Data tambahan:

Additional data:

Faktor keberkesanan (*Effectiveness factor*), $\eta = \frac{3}{\phi_1^2} (\phi_1 \coth \phi_1 - 1)$

Thiele modulus, $\phi_1 = R \sqrt{\frac{k_1 S_a \rho_p}{D_e}}$

$$\frac{C_A}{C_{A_s}} = \frac{1}{\lambda} \left(\frac{\sinh \phi_1 \lambda}{\sinh \phi_1} \right)$$

$$\lambda = \frac{r}{R}$$

(10 markah)

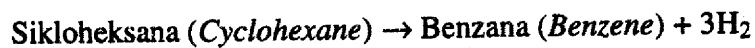
- [b] Penguraian sikloheksana kepada benzana dan hidrogen adalah dihadkan oleh pemindahan jisim pada suhu tinggi. Tindakbalas dilakukan dalam reaktor padat (5 cm ID x 20 m panjang) dengan intil panjang bulat bergarispusat 0.5 cm dan panjang 0.5 cm. Intil-intil disaluti dengan mangkin cuma di bahagian luarnya. Keliangan padatan adalah 40%. Kadar aliran volumetri masuk ialah 60 dm³/min.

The decomposition of cyclohexane to benzene and hydrogen is mass transfer limited at high temperatures. The reaction is carried out in a packed reactor (5 cm ID x 20 m length) with cylindrical pellets 0.5 cm in diameter and 0.5 cm in length. The pellets are coated with catalyst only on the outside. The bed porosity is 40%. The entering volumetric flow rate is 60 dm³/min.

Apakah panjang reaktor yang diperlukan untuk mencapai 99.9% penukaran sikloheksana daripada aliran gas masuk yang mengandungi 5% sikloheksana dan 95% H₂ pada 2 atm dan 500°C.

What will be the required length of the reactor necessary to achieve 99.9% conversion of cyclohexane from an entering gas stream of 5% cyclohexane and 95% H₂ at 2 atm and 500°C.

Data tambahan:
Additional data:



Pembauran sikloheksana dalam H₂:
Diffusivity of cyclohexane in H₂:

$$D_{\text{Cyclohexane} - \text{H}_2} (500^\circ\text{C}, 2 \text{ atm}) = 0.856 \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$$

Kelikatan gas (*Viscosity of gas*) = 0.00017 g/cm-s
Ketumpatan campuran gas (*Density of gas mixture*) = 0.00019 g/cc
Faktor bentuk intil (*Shape factor of pellet*), $\gamma = 1.146$
Isipadu intil (*Volume of pellet*) = 0.098 cc
Garis pusat intil (*Diameter of pellet*), $d_p = 0.572 \text{ cm}$

$$Sh' = Re'^{1/2} Sc^{1/3}$$

dimana
where

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D_{AB}}$$

$$Re = \frac{d_p \cdot \rho \cdot U}{\mu}$$

$$Sh' = \frac{k_c d_p}{D_{AB}} \left(\frac{\epsilon_b}{1 - \epsilon_b} \right) \frac{1}{\gamma}$$

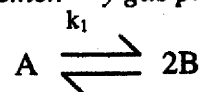
$$Re' = \frac{Re}{(1 - \epsilon_b)\gamma}$$

U = halaju permukaan melalui padatan
U = superficial velocity through bed

(15 markah)

BAHAGIAN B

5. Tindakbalas asas fasa gas:
The elementary gas phase reaction



dilakukan dalam reaktor aliran. Suapannya yang mempunyai suhu 27°C, mengandungi 80% A dan yang lainnya adalah lengai. Kadar aliran volumetri memasuki reaktor pada suhu ini ialah 100 dm³/min. Kepekatan A dalam suapan pada 27°C ialah 0.5 mol/dm³. Untuk 80% penukaran keseimbangan adiabatik:

is to be carried out in flow reactor. The feed, which is at a temperature of 27°C, consists of 80% of A and the remainder inerts. The volumetric flow rate entering the reactor at this temperature is 100 dm³/min. The concentration of A in the feed at 27°C is 0.5 mol/dm³. For 80% of the adiabatic equilibrium conversion:

- [a] Kirakan isipadu reaktor aliran penyumbat apabila tindakbalas ini dilakukan secara adiabatik.

Calculate the volume of a plug flow reactor when the reaction is carried out adiabatically.

(25 markah)

Abaikan turunan tekanan dalam reaktor.
Neglect the pressure drop across the reactor.

Data tambahan:
Additional data:

Penukaran keseimbangan adiabatik adalah 0.075.
The adiabatic equilibrium conversion is 0.075.

$$C_{PA} = 12 \frac{\text{J}}{\text{mol.K}} \quad C_{PB} = 10 \frac{\text{J}}{\text{mol.K}} \quad C_{PI} = 15 \frac{\text{J}}{\text{mol.K}}$$

Haba tindakbalas berfungsi kepada suhu dan nilainya pada 300K ialah $-75,000 \text{ J}$ untuk setiap mol A. Pada 300K,

The heat of reaction is a function of temperature and its value at 300K is $-75,000 \text{ J}$ per mole of A. At 300K,

$$k_1 = 0.217 \text{ min}^{-1} \quad K_e = 70,000 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$

Pemalar kadar k_1 dan pemalar keseimbangan K_e berubah dengan suhu seperti:
The rate constant k_1 and equilibrium constant K_e varies with temperature as:

$$k_1 = 0.217 \exp \left[1022 \left(\frac{1}{300} - \frac{1}{T} \right) \right]$$

$$K_e = 70,000 \exp \left[9310 \left(\frac{300 - T}{300T} \right) - 0.038 \ln \frac{T}{300} \right]$$

di mana (where) T = suhu (temperature), K

Lampiran

Useful integral:

$$\int_0^X \left(\frac{1+\epsilon x}{1-x} \right) dx = (1+\epsilon) \ln \frac{1}{1-X} - \epsilon X.$$

Ideal gas constant R:

$$R = 0.082 \frac{\text{liter. atm}}{\text{mol. K}} = \frac{0.082 \text{m}^3 \cdot \text{atm}}{\text{k mol. K}}$$

$$R = \frac{8.3144 \text{J}}{\text{mol. K}} = 1.987 \frac{\text{cal}}{\text{mol. K}}$$

Simpson's Rule of integrationFor $N + 1$ points, where $\left(\frac{N}{3}\right)$ is an integer,

$$\int_{X_0}^{X_N} f(X) dX = \frac{3}{8} h [f_0 + 3f_1 + 3f_2 + 2f_3 + 3f_4 + 3f_5 + 2f_6 + \dots + 3f_{N-1} + f_N]$$

$$\text{where } h = \frac{X_N - X_0}{N}$$

For $N + 1$ points, where N is even

$$\int_{X_0}^{X_N} f(X) dX = \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \dots + 4f_{N-1} + f_N)$$