UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

First Semester Examination
2016/2017 Academic Session

December 2016 / January 2017

EKC 336 – Chemical Reaction Engineering
[Kejuruteraan Tindak Balas Kimia]

Duration : 3 hours
[Masa : 3 jam]

Please check that this examination paper consists of SEVEN pages of printed material before you begin the examination.

[Sila pastikan bahawa kertas peperiksaan ini mengandungi TUJUH muka surat yang bercetak sebelum anda memulakan peperiksaan ini.]

Instruction: Answer **ALL** (4) questions.

*[**Arahan:** Jawab **SEMUA** (4) soalan.]*

In the event of any discrepancies, the English version shall be used.

[Sekiranya terdapat sebarang percanggahan pada soalan peperiksaan, versi Bahasa Inggeris hendaklah diguna pakai.]

Answer ALL questions.

1. [a] A reaction has the stoichiometric equation $A + B \rightarrow 2C$. Determine the order of reaction.

[2 marks]

[b] Experimental studies of a specific decomposition of A in a batch reactor using pressure units show exactly the same rate at two different temperatures:

$$-r_A = 2.3p_A^2 \; at \; 400K$$

$$-r_A = 2.3p_A^2 \; at \; 500K$$

$$where, -r_A = \left[\frac{mol}{m^3.s}\right], p_A = [atm]$$

$$Universal\ gas\ constant, R = 82.06 \times 10^{-6}\ \frac{m^3.atm}{mol.K}$$

Transform the rate expressions into concentration units and then evaluate the activation energy.

Note: The pressure is not excessive, so the ideal gas law can be applied.

[10 marks]

[c] The irreversible liquid phase second order reaction:

$$2A \xrightarrow{k_1} B \quad k_1 = 0.03\ dm^3/mol \cdot s$$

is carried out in a *CSTR*. The entering concentration of A, C_{A0}, is 2 molar and the exit concentration of A, C_A is 0.1 molar. The entering and exiting volumetric flow rate is constant at 3 dm^3/s. Calculate the corresponding reactor volume.

[8 marks]

[d] Derive the differential and integral forms of design equations for plug flow reactor *(PFR)*.

[5 marks]

Jawab SEMUA soalan.

1. [a] *Satu tindak balas mempunyai persamaan stoikiometrik* A + B → 2C. *Tentukan tertib tindak balas.*

[2 markah]

[b] *Kajian eksperimen penguraian spesifik* A *di dalam reaktor berkelompok menggunakan unit tekanan menunjukkan kadar yang sama pada dua suhu berbeza:*

$$-r_A = 2.3p_A^2 \; pada \; 400K$$

$$-r_A = 2.3p_A^2 \; pada \; 500K$$

$$di \; mana, -r_A = \left[\frac{mol}{m^3.s}\right], p_A = [atm]$$

$$Pemalar \; gas \; unggul, R = 82.06 \times 10^{-6} \; \frac{m^3.atm}{mol.K}$$

Tukarkan persamaan kadar ke dalam unit kepekatan dan seterusnya nilaikan tenaga pengaktifan.

Nota: Tekanan tidak melampau, jadi hukum gas unggul boleh digunakan.

[10 markah]

[c] *Tindak balas fasa cecair tertib kedua tidak berbalik:*

$$2A \xrightarrow{k_1} B \;\; k_1 = 0.03 \; dm^3/mol \cdot s$$

dijalankan di dalam CSTR. Kepekatan masuk A, C_{A0}, *adalah 2 molar dan kepekatan keluar* A, C_A *adalah 0.1 molar. Kadar aliran volumetrik masuk dan keluar adalah malar pada 3* dm^3/s. *Kirakan isipadu reaktor terbabit.*

[8 markah]

[d] *Terbitkan persamaan rekabentuk pembezaan dan pengamiran untuk reaktor aliran berpalam (*PFR*).*

[5 markah]

2. [a] The gas phase reaction

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

is to be carried out isothermally. The molar feed is 50% H_2 and 50% N_2, at a pressure of 16.4 atm and 227°C.

[i] Construct a complete stoichiometric table.

[5 marks]

[ii] What are the values of C_{A0}, δ and ε? Calculate the concentrations of NH_3 and H_2 when $X_{H2} = 0.6$.

[6 marks]

[iii] If the reaction is elementary with $k_{N2} = 40$ dm^3/mol.s. Write the rate of reaction solely as a function of conversion for :

[iii].[i] A flow system
[iii].[ii] A constant volume batch system.

[4 marks]

[b] Reactant A decomposes in a batch reactor.

$$A \rightarrow B$$

The decomposition of A in the reactor is measured at varying times with results shown in the following Table Q.1.[b]. Using fractional life method with $F = 0.8$, find a rate equation to represent the data.

[10 marks]

Table Q.1.[b].: Time-concentration data

Time, *t(s)*	0	20	40	60	120	180	300
Concentration C_A(mol/liter)	10	8	6	5	3	2	1

3. [a] A component A converts into B and C via three parallel reactions listed below:

$$A \rightarrow B,\ r_1 = k_1 = 18$$
$$A \rightarrow C,\ r_2 = k_2 C_A = 12 C_A$$
$$A \rightarrow C,\ r_3 = k_3 C_A^2 = 2\ C_A^2$$

where rates are in mol.L^{-1}.min^{-1} and concentrations in mol.L^{-1}.

[i] Plot the graph of the selectivity of C versus the concentration of A (C_A) in the range of 0 to 10 mol.L^{-1}. Suggest the strategy to maximize the selectivity of C.

[10 marks]

[ii] If you are the design engineer, do you recommend *PFR* or *CSTR*? Justify your recommendation.

[5 marks]

2. [a] *Tindak balas fasa gas*

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

dijalankan secara isoterma. Suapan molar adalah 50% H_2 dan 50% N_2, pada tekanan 16.4 atm dan 227°C.

[i] Bina jadual stoikiometrik yang lengkap.

[5 markah]

[ii] Apakah nilai C_{A0}, δ and ε? Kirakan kepekatan NH_3 dan H_2 bila $X_{H2} = 0.6$.

[6 markah]

[iii] Jika tindak balas adalah asas dengan $k_{N2} = 40\ dm^3/mol.s$. Tulis kadar tindak balas sebagai fungsi penukaran untuk :

[iii].[i] Sistem aliran
[iii].[ii] Sistem kelompok isipadu malar.

[4 markah]

[b] Reaktan A terurai di dalam reaktor.

$$A \rightarrow B$$

Penguraian A di dalam reaktor di ukur pada masa yang berbeza dengan keputusan ditunjukkan di dalam Jadual S.1.[b] berikut. Menggunakan kaedah hayat pecahan dengan F = 0.8, cari persamaan kadar untuk mewakili data.

[10 markah]

Jadual S.1.[b].: Data masa-kepekatan

Masa, t(s)	*0*	*20*	*40*	*60*	*120*	*180*	*300*
Kepekatan C_A(mol/liter)	*10*	*8*	*6*	*5*	*3*	*2*	*1*

3. [a] *Komponen A bertukar kepada B dan C melalui tiga tindak balas selari yang disenaraikan di bawah:*

$$A \rightarrow B,\ r_1 = k_1 = 18$$
$$A \rightarrow C,\ r_2 = k_2 C_A = 12 C_A$$
$$A \rightarrow C,\ r_3 = k_3 C_A^2 = 2\ C_A^2$$

di mana kadar adalah dalam $mol.L^{-1}.min^{-1}$ dan kepekatan dalam $mol.L^{-1}$.

[i] Plotkan graf kememilihan C berbanding kepekatan A (C_A) dalam julat 0 - 10 $mol.L^{-1}$. Cadangkan strategi untuk memaksimumkan kememilihan C.

[10 markah]

[ii] Jika anda ialah jurutera reka bentuk, adakah anda mengesyorkan PFR atau CSTR? Jelaskan cadangan anda.

[5 markah]

[b] The concentration readings of a continuous response are summarized in Table Q.3.[b].

[i] Tabulate and plot the exit age distribution *E*.

[5 marks]

[ii] Calculate the mean residence time of fluid in the vessel *t*.

Table Q.3.[b]

Time t(min)	0	5	10	15	20	25	30	35
C_{pulse} (g/L)	0	6	10	10	8	4	2	0

[5 marks]

4. [a] A gas-phase decomposition is adiabatically conducted in a batch reactor. The decomposition reaction is shown be

$$A \rightarrow R + S$$

The initial temperature is 300 *K* while the initial volume is 0.5 m^3. The total pressure is constant at 500 kPa. The C_p values for *A*, *R* and *S* are 185.6, 104.7, and 80.9 $J.mol^{-1}.K^{-1}$ respectively. The enthalpy of reaction is -6280 $J.(mol\ A)^{-1}$. The reaction is first order with respect to *A* with $k_A = 10^{14}e^{-10,000/T}h^{-1}$.

[i] Derive the material balance and energy balance equations in the simplest form for above reaction conducted in a batch reactor.

[8 marks]

[ii] Using the energy balance, determine and plot the temperature profile for the conversion range of 0.00 to 0.99. The step size should not be smaller than 0.2.

[6 marks]

[iii] Using the temperature in Q.4.[a][ii], determine the residence time to achieve a conversion of 0.99.

[4 marks]

[iv] Based on the calculation in [ii] and [iii], comment on the feasibility of this reaction in an adiabatic batch reactor.

[2 marks]

[b] The performance of a continuous flow reactor depends on the flow and mixing patterns to a great extent. Residence-time distribution *(RTD)* is usually used to analyze the performance of a real reactor.

[i] List 3 factors that cause the real reactors to deviate from ideal flow patterns.

[3 marks]

[ii] Name 2 types of *RTD* measurement.

[2 marks]

[b] *Bacaan-bacaan kepekatan maklumbalas yang berterusan diringkaskan dalam Jadual S.3.[b].*

[i] *Jadual dan plotkan taburan umur keluar E.*

[5 markah]

[ii] *Kirakan masa mastautin min t bagi bendalir dalam bekas.*

Jadual S.3.[b]

Time t(min)	*0*	*5*	*10*	*15*	*20*	*25*	*30*	*35*
C_{pulse} *(g/L)*	*0*	*6*	*10*	*10*	*8*	*4*	*2*	*0*

[5 markah]

4. [a] *Suatu penguraian dalam fasa gas dijalankan secara adiabatik dalam reaktor kelompok. Tindak balas penguraian ditunjukkan seperti berikut.*

$$A \rightarrow R + S$$

Suhu awal ialah 300 K *manakala isipadu awal adalah 0.5* m^3. *Jumlah tekanan adalah malar pada 500 kPa. Nilai* C_p *untuk* A, R *dan* S *ialah masing-masing 185.6, 104.7 dan 80.9* $J.mol^{-1}.K^{-1}$. *Entalpi tindak balas ialah -6280* $J.(mol\ A)^{-1}$. *Tindak balas adalah tertib pertama terhadap* A *dengan* $k_A = 10^{14} e^{-10,000/T}\ h^{-1}$.

[i] *Terbitkan imbangan jisim dan tenaga dalam bentuk yang paling ringkas untuk tindak balas di atas yang dijalankan dalam reaktor kelompok.*

[8 markah]

[ii] *Dengan menggunakan imbangan tenaga, tentukan dan plotkan lengkung suhu untuk pelbagai penukaran 0.00 hingga 0.99. Saiz langkah tidak boleh lebih kecil daripada 0.2.*

[6 markah]

[iii] *Menggunakan suhu yang dikira dalam soalan S.4.[a].[ii], tentukan masa mastautin untuk mencapai penukaran 0.99.*

[4 markah]

[iv] *Berdasarkan pengiraan dalam [ii] dan [iii], ulaskan mengenai kemungkinan tindak balas ini dalam reaktor kelompok adiabatik.*

[2 markah]

[b] *Prestasi bagi suatu reaktor aliran berterusan banyak bergantung kepada corak pengaliran dan pencampuran. Taburan masa mastautin (*RTD*) biasa digunakan untuk menganalisa prestasi reaktor sebenar.*

[i] *Senaraikan 3 faktor yang menyebabkan reaktor sebenar menyimpang daripada corak pengaliran unggul.*

[3 markah]

[ii] *Namakan 2 jenis pengukuran* RTD.

[2 markah]

-oooOooo-