
UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Second Semester Examination
2012/2013 Academic Session

June 2013

EKC 337 – Reactor Design and Analysis
[Rekabentuk Dan Analisis Reaktor]

Duration : 3 hours
[Masa : 3 jam]

Please ensure that this examination paper contains NINE printed pages before you begin the examination.

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

Instruction: Answer **ALL** questions.

Arahan: Jawab **SEMUA** soalan.]

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

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

...2/-

Answer ALL questions.

Jawab SEMUA soalan.

1. [a] Discuss the importance of chemisorption in a chemical reaction.
Bincangkan kepentingan jerapan kimia dalam suatu tindak balas kimia.
[5 marks/markah]

- [b] Given in Figure Q.1.[b]. is the generalized diagram of turnover frequency (TOF) versus reaction temperature for various industrial reactions. Provide an analysis of the figure on the basis of the occurrence of chemisorption, energy barrier and reaction rate.

Rajah S.1.[b]. menunjukkan rajah umum bagi frekuensi pusingan balik (TOF) melawan suhu tindak balas bagi beberapa tindak balas industri. Berikan analisis anda terhadap rajah tersebut berasaskan kejadian jerapan kimia, halangan tenaga dan kadar tindak balas.

[5 marks/markah]

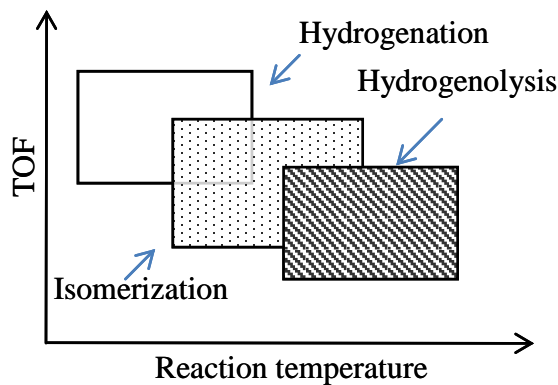


Figure Q.1.[b].

Rajah S.1.[b].

- [c] In phenol production process, fresh cumene is first oxidized to cumene hydroperoxide (CHP). Catalytic decomposition of CHP to phenol is an acid-catalyzed process and homogeneous H_2SO_4 acid is usually used for that purpose.

Dalam proses penghasilan fenol, kumena segar dioksidakan ke kumena hidroperoksida (CHP). Penguraian bermangkin CHP ke fenol merupakan proses bermangkin asid dan asid H_2SO_4 homogen selalunya digunakan untuk tujuan tersebut.

- [i] Briefly discuss 3 disadvantages of homogeneous catalyst in the decomposition of CHP.

Bincangkan secara ringkas, 3 kekurangan mangkin homogen dalam penguraian CHP.

- [ii] Suggest two types of heterogeneous catalysts that can be used in place of H_2SO_4 acid.

Cadangkan dua jenis mangkin heterogen yang boleh digunakan bagi menggantikan asid H_2SO_4 .

[5 marks/markah]

...3/-

- [d] Zeolite catalysts are usually useful for catalytic cracking of naphtha that is formed in the fractional distillation of crude oil (petroleum) to form smaller and more useful organic molecules. Explain the properties of these catalysts that make them suitable for this type of reaction.

Mangkin zeolit selalunya berguna dalam pemecahan bermangkin bagi nafta yang dihasilkan dalam penyulingan berperingkat minyak mentah (petroleum) untuk membentuk molekul organik lain yang lebih kecil dan berguna. Terangkan sifat-sifat mangkin ini yang membolehkan mereka sesuai untuk digunakan dalam tindak balas ini.

[5 marks/markah]

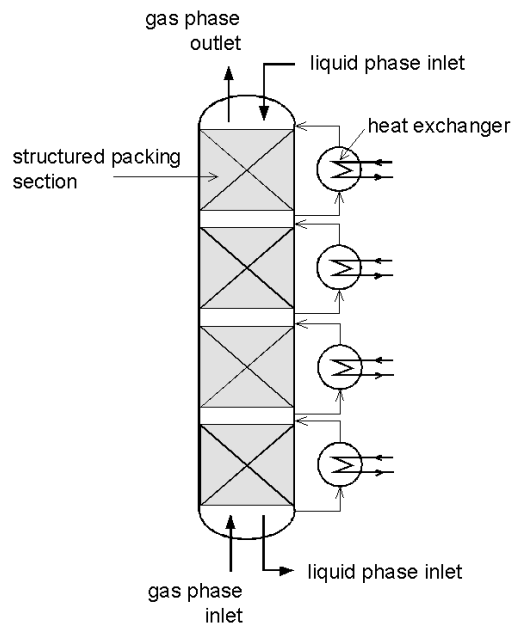


Figure Q.1.[e].

Rajah S.1.[e].

- [e] Shown above Figure Q.1.[e]. is a typical structured packing catalytic reactor system for a gas-liquid reaction. Provide reasons to the questions below.

Rajah S.1.[e]. di atas menunjukkan sistem reaktor bermangkin dengan alas berstruktur yang biasa bagi suatu tindak balas gas-cecair. Berikan sebab-sebab bagi kenyataan di bawah.

- [i] Structured catalyst should ideally be used in this reactor.
Mangkin berstruktur patut digunakan dalam reaktor ini.
- [ii] Heat exchanger is needed in this reactor system.
Penukar haba diperlukan dalam sistem reaktor ini.
- [iii] A multi-layer catalyst bed is more suitable to be used instead of single bed.
Alas mangkin pelbagai lapisan lebih sesuai digunakan berbanding alas tunggal.

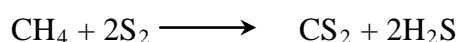
...4/-

[iv] Should the liquid phase reactant pumped from the top of the reactor.
Bahan tindak balas cecair perlu dipam dari bahagian atas reaktor.

[v] Space in between the catalyst bed is really necessary.
Ruang antara alas mangkin sangat diperlukan. [5 marks/markah]

2. The homogeneous gaseous reaction between sulphur vapour and methane has been studied in a small silica-tube reactor of 35.2 cm³ volume, where the chemical equation proceeds as below;

Satu tindak balas gas homogen di antara wap sulfur dan metana telah dilakukan di dalam reaktor tiub-silika kecil yang berisipadu 35.2 sm³ di mana persamaan tindak balas kimia diberikan seperti di bawah;



In a particular run at 600 °C and 1 atm pressure, the measured quantity of carbon disulphide produced in a 10 min run was 0.10 g by assuming that all the sulphur present is the molecular species S₂. The sulphur vapour (considered as S₂) flow rate was 0.238 g·mol⁻¹·h⁻¹ in this steady-state run.

Di dalam satu ujikaji pada suhu 600 °C dan tekanan 1 atm, kuantiti karbon disulfida yang diukur pada 10 min ujikaji dijalankan adalah 0.10 g. Ujikaji dijalankan dengan menganggap bahawa semua sulfur yang wujud mempunyai spesies molekul S₂. Wap sulfur (yang dianggap sebagai S₂) mempunyai kadar aliran 0.238 g·mol·j⁻¹ pada keadaan-mantap ini.

[a] What is the rate of reaction, expressed in g·mol of carbon disulphide produced h⁻¹·cm⁻³ reactor volume?

Apakah kadar tindak balas yang diungkap dalam g·mol untuk karbon disulfida j⁻¹·sm⁻³ isipadu reaktor?

[5 marks/markah]

[b] The rate of 600 °C may be expressed by the second order equation given by;

Kadar pada suhu 600 °C mungkin boleh diungkapkan oleh persamaan tertib kedua yang diberi oleh;

$$r = kp_{\text{CH}_4} p_{\text{S}_2}$$

where p is partial pressure in atm. Use the rate determined in Q.2.[a]. and this form of rate equation to calculate the specific reaction rate in units of g·mol·cm⁻³·atm⁻²·h⁻¹. The flow rate of methane gas was 0.119 g·mol·h⁻¹ and the H₂S and CS₂ concentrations in the reactants were zero.

di mana p adalah tekanan separa dalam atm. Gunakan kadar yang ditentukan pada S.2.[a]. dan bentuk ungkapan persamaan kadar ini untuk mengira kadar tindak balas tentu dalam unit g·mol·cm⁻³·atm⁻²·j⁻¹. Kadar aliran gas metana adalah 0.119 g·mol·j⁻¹ dan kepekatan H₂S serta CS₂ masing-masing adalah sifar.

[10 marks/markah]

...5/-

- [c] [i] Compute the value of k without making the assumption that the rate is constant and that average values of the partial pressure may be used (consider the equipment to carry out the reaction is an integral reactor rather than differential reactor).

Kirakan nilai k tanpa membuat andaian bahawa kadar tindak balas adalah satu pemalar dan purata nilai tekanan separa boleh digunakan (dengan mengambil kira peralatan yang digunakan untuk menjalankan tindak balas adalah sebuah reaktor bersepadu dan bukannya reaktor kebezaan).

[5 marks/markah]

- [ii] Compare the results and comment on the suitability of the apparatus (reactor) as a differential reactor.

Bandingkan penyelesaian-penyelesaian yang diperolehi dan beri ulasan berdasarkan kesesuaian peralatan (reaktor) sebagai reaktor kebezaan.

[5 marks/markah]

3. [a] Despite producing catalysts with good metal dispersion, catalyst preparation method through ion-exchange process has several drawbacks. Provide your arguments to support this statement.

Walaupun mampu menghasilkan mangkin dengan serakan logam yang baik, kaedah penyediaan menerusi proses penukaran ion mempunyai beberapa kelemahan. Berikan hujah-hujah anda untuk menyokong kenyataan ini.

[5 marks/markah]

- [b] A $\text{Fe}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ supported catalyst with 10 wt. % of Fe loading in the finish catalyst is synthesized to be used for ammonia production process by reacting nitrogen with hydrogen. Incipient wetness impregnation method is used for the catalyst synthesis using 24.0 g of $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ and 15 mL of $\text{Fe}(\text{NO}_3)_2$ solution followed by drying, calcination and reduction. Calculate the suitable concentration of metal solution to be used in the synthesis process of the supported catalyst.

Suatu mangkin bersokongan $\text{Fe}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ dengan 10 wt% bebanan Fe disintesis untuk digunakan dalam proses penghasilan amonia menerusi tindak balas antara nitrogen dan hidrogen. Kaedah pengisian awal kelembapan digunakan untuk penghasilan mangkin menggunakan 24.0 g $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ dan 15 mL $\text{Fe}(\text{NO}_3)_2$ diikuti dengan pengeringan, pengkalsinan dan penurunan. Kirakan kepekatan larutan logam tersebut yang perlu digunakan dalam penyediaan mangkin bersokongan tersebut.

(Atomic weight : Fe: 55.8, N: 14.0, O: 16.0)

(Berat atom : Fe: 55.8, N: 14.0, O: 16.0)

[5 marks/markah]

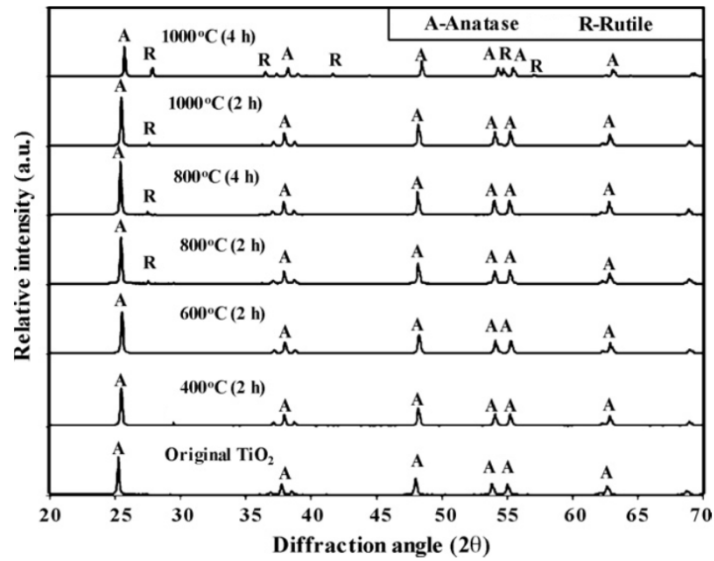


Figure Q.3.[c].

Rajah S.3.[c].

- [c] Figure Q.3.[c]. shows XRD results of a TiO_2 catalyst support material when exposed to a certain heat treatment at different temperatures as well as different durations of exposure.

Rajah S.3.[c]. menunjukkan keputusan XRD bagi bahan TiO_2 apabila didedahkan terhadap pengolahan haba pada suhu dan tempoh yang berlainan.

- [i] What are two main differences between anatase and rutile phases of TiO_2 ?
Apakah dua perbezaan utama antara fasa anatasa dan rutil bagi TiO_2 ?
- [ii] What are 3 possible conclusions that can be obtained from the results?
Apakah 3 kesimpulan yang boleh diperolehi dari keputusan ini?
- [iii] If the sample is subsequently used for preparation of a metal catalyst for the combustion of organics in industrial air emission at 900°C , predict a likely consequence and provide reason for it.

Sekiranya sampel ini kemudiannya digunakan untuk penyediaan mangkin logam untuk pembakaran bahan organik dalam udara keluaran industri pada 900°C , ramalkan akibat yang mungkin berlaku dan berikan sebabnya.

[7 marks/markah]

- [d] In the measurement of surface area of a Ni/γ-alumina catalyst to be used for steam reforming of methane, the following N₂ adsorption data are obtained.

Dalam pengukuran luas permukaan bagi mangkin Ni/γ-alumina untuk digunakan untuk pembentukan semula stim bagi metana, data penjerapan berikut diperolehi.

Table Q.2.[d].
Jadual S.2.[d].

P/P _o	V cm ³ STP/g
0.0493	39.70
0.0789	43.62
0.1091	47.06
0.1382	50.17
0.1678	53.22
0.1978	56.28
0.2429	60.98
0.2832	65.46
0.3265	70.69
0.3235	70.04
0.2794	64.75
0.2426	60.69
0.2017	56.39
0.1709	53.25
0.1408	50.16

(Take N_{Avogadro} = 6.023 x 10²³ molecules/mole and each N₂ molecule occupies 0.162 nm²). Useful equation with usual symbols;

(Ambil N_{Avogadro} = 6.023 x 10²³ molekul/mol dan setiap molekul N₂ menduduki 0.162 nm²). Persamaan yang biasa ialah

$$\frac{x}{V(1-x)} = \frac{1}{cV_m} + \frac{(c-1)x}{cV_m}$$

- [i] Calculate the Brunauer-Emmett-Teller (BET) specific surface area of the catalyst.

Kirakan luas permukaan spesifik Brunauer-Emmett-Teller (BET) bagi mangkin tersebut.

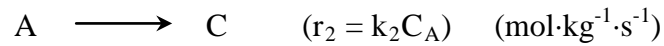
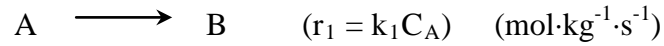
- [ii] Provide 2 circumstances under which accurate result cannot be obtained.

Berikan 2 keadaan yang boleh menyebabkan keputusan yang tepat tidak dapat diperolehi.

[8 marks/markah]

4. The parallel decomposition of a hydrocarbon is to be carried out in an isothermal fluidized bed reactor with the chemical rate equations given below;

Penguraian selari suatu hidrokarbon akan dilaksanakan menggunakan reaktor lapisan terbendalir sesuhu dengan persamaan kadar tindak balas kimia seperti di bawah;



Geldart classification of the catalyst particles suggests that bubble bed operation is feasible. As a preliminary design, a two-phase fluidization model is to be employed, involving the plug flow of the bubble phase. The net gas flow through the emulsion phase is predicted to be negligible. Furthermore, any reaction in the bubble phase is expected to be insignificant.

Klasifikasi Geldart bagi zarah pemangkin berpendapat bahawa operasi lapisan gelembung boleh dilaksanakan. Sebagai rekabentuk awal, model terbendalir dua-fasa yang merangkumi aliran palam bagi fasa gelembung akan digunakan. Aliran gas bersih melalui fasa emulsi diramalkan sebagai terabai. Sebagai tambahan, mana-mana tindak balas pada fasa gelembung dianggap sebagai tidak penting.

- [a] Comment on the conditions at which the gas flow rate through the emulsion phase can be neglected.
Berikan ulasan anda bagi keadaan-keadaan di mana kadar aliran gas melalui fasa emulsi boleh diabaikan.

[2 marks/markah]

- [b] Using appropriate parameters listed below, write down the material balance for the bubble phase. State any additional assumptions made in your derivation.

Dengan menggunakan pembolehubah-pembolehubah yang sesuai seperti yang tersenarai di bawah, tuliskan imbangan jisim untuk fasa gelembung. Nyatakan anggapan-anggapan tambahan yang dibuat di dalam terbitan anda.

[8 marks/markah]

Model parameters:

f_b	fraction of bed occupied by bubbles
g_b	mass of solids in bubble phase ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)
g_e	mass of solids in emulsion phase ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)
K_l	gas interchange coefficient between bubble and emulsion phases (s^{-1})
L	length of fluidized bed (m)
u_b	bubble velocity ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)
u_0	feed gas velocity ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)

Pembolehubah-pembolehubah model:

- f_b pecahan lapisan yang dipenuhi oleh gelembung
- g_b jisim pepejal untuk fasa gelembung ($kg \cdot m^{-3}$)
- g_e jisim pepejal untuk fasa emulsi ($kg \cdot m^{-3}$)
- K_I pekali perubahan-antara gas di antara fasa gelembung dan fasa emulsi (s^{-1})
- L panjang lapisan terbendalir (m)
- u_b halaju gelembung ($m \cdot s^{-1}$)
- u_0 halaju gas ($m \cdot s^{-1}$)

- [c] Show that at any bed position, the emulsion phase concentration of reactant (C_{Ae}) is given by;

Tunjukkan pada mana-mana posisi lapisan, kepekatan fasa emulsi bagi bahan tindak balas (C_{Ae}) adalah diberikan oleh;

$$C_{Ae} = \kappa C_{Ab}$$

where C_{Ab} is the bubble phase gas concentration and κ is a constant. What is the functional relationship of κ with respect to the gas interchange coefficient (K_I) and the reaction rate constants k_1 and k_2 ?

di mana, C_{Ab} adalah kepekatan gas bagi fasa gelembung dan κ adalah pemalar. Apakah hubungan fungsi bagi κ berdasarkan pekali perubahan-antara gas (K_I) dan pemalar-pemalar tindak balas k_1 dan k_2 ?

[5 marks/markah]

- [d] Show that under the operating conditions specified in [c] above, the conversion of A is given by;

Tunjukkan pada keadaan operasi yang dinyatakan pada [c] di atas, perubahan bagi A, diberikan oleh;

$$x_A = 1 - e^{\left[\frac{-K_I(1-\kappa)L}{u_0} \right]}$$

[8 marks/markah]

- [e] How would the above expression derived in [d] change for a process which was severely limited by gas interchange between the two phases?

Bagaimanakah persamaan yang diterbitkan pada [d] berubah mengikut proses yang sangat terhad oleh perubahan-antara gas di antara dua fasa tersebut?

[2 marks/markah]