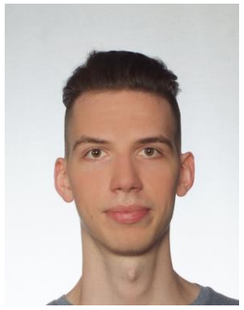
POLITECHNIKA WARSZAWSKA
Wydział Inżynierii Chemicznej i Procesowej

Praca dyplomowa inżynierska

Opracowanie modelu matematycznego opisującego przebieg reakcji zmydlania octanu etylu w roztworach wodnych



Autor: Adam Zięba

Nr albumu: 298099

Promotor: dr inż. Michał Lewak

Rok akademicki: 2021/2022

Wprowadzenie

Reakcje homogeniczne należą do najczęściej występujących reakcji w przemyśle chemicznym. W wielu przypadkach reakcja jest głównym etapem całego procesu technologicznego i to ona decyduje o liczbie i kolejności przemian fizycznych, którym powinny zostać poddane substraty oraz produkty. Badanie kinetyki polega na ustaleniu rzędu reakcji względem każdego z reagentów oraz na określeniu zależności szybkości reakcji od temperatury i stężenia tych reagentów w danych warunkach.

Cel i zakres pracy

Celem pracy jest opracowanie modelu matematycznego opisującego przebieg reakcji octanu etylu z wodorotlenkiem sodu. Szybkość reakcji zależy od stężeń reagentów i od temperatury. Zakres pracy obejmuje:

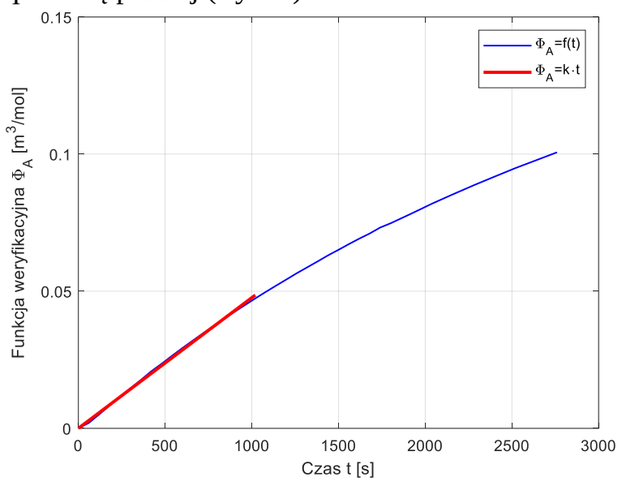
- Badania laboratoryjne polegające na przeprowadzeniu omawianej reakcji dla pięciu różnych wartości temperatur w reaktorze zbiornikowym o działaniu okresowym;
- Wykonanie obliczeń pozwalających uzyskać profile stężeń substratów w czasie dla każdej serii pomiarowej;
- Przegląd literatury w poszukiwaniu informacji na temat badania kinetyki reakcji homogenicznych.

Część doświadczalna

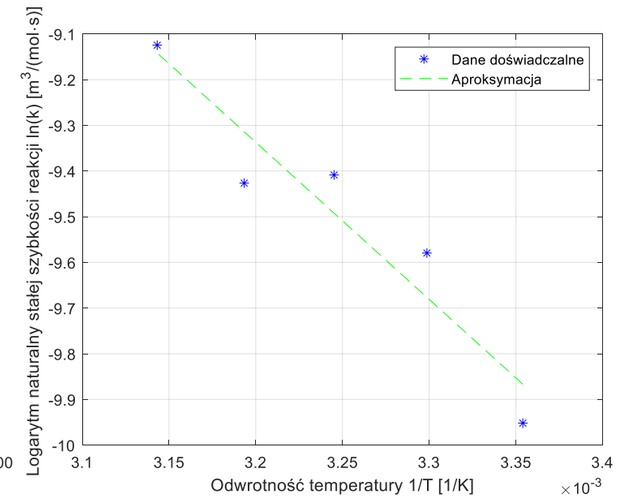
Reakcję prowadzono w reaktorze zbiornikowym o działaniu okresowym dla pięciu wartości temperatur: 25, 30, 35, 40, 45 [°C]. Reaktor umieszczony w termostatowanym naczyniu był wyposażony w mieszadło mechaniczne. Wielkością mierzoną była przewodność właściwa mieszaniny, która z uwagi na przemianę wodorotlenku sodu, ulegała spadkowi wraz z postępem reakcji. Stosowano takie same stężenia początkowe substratów, aby kinetykę reakcji można było uzależnić od zmian tylko jednego z nich. Założono model reakcji drugorzędowej. Stosując metodę całkową badania kinetyki reakcji dokonano aproksymacji linią prostą wykresu obrazującego zależność funkcji weryfikacyjnej od czasu dla każdej serii pomiarów. Rys. 1 przedstawia ten zabieg dla serii T=25°C. Nachylenie prostej aproksymującej odpowiada stałej szybkości reakcji.

Wyniki

Przeprowadzenie obliczeń dla każdej serii pomiarowej poskutkowało otrzymaniem pięciu wartości stałej szybkości reakcji. Następnie dokonano aproksymacji zależności $\ln k = f(1/T)$ za pomocą prostej (Rys. 2).



Rys.1. Aproksymacja prostą funkcji weryfikacyjnej dla serii T=25°C



Rys.2. Aproksymacja prostą zależności $\ln k = f(1/T)$

Funkcja przedstawiona na Rys. 2 odpowiada zlinearyzowanej postaci równania Arrheniusa, które opisuje zależność stałej szybkości reakcji od temperatury. Nachylenie prostej oraz jej przesunięcie pozwoliło wyznaczyć energię aktywacji i współczynnik częstości reakcji.

$$E \cong 28{,}6\frac{kJ}{mol}, \qquad k_0 \cong 5{,}30\frac{m^3}{mol \cdot s}$$

Uzyskane wyniki porównano z wartościami otrzymanymi w innych pracach naukowych na temat badania kinetyki tej reakcji. Zaobserwowano znaczne różnice w wartościach stałych szybkości reakcji dla odpowiednich temperatur.

Wnioski

Przeprowadzone badania jasno pokazują, że model matematyczny reakcji zmydlania octanu etylu zasadą sodową może nie być prostą zależnością drugiego rzędu. Niemniej, potwierdzenie tego wniosku wymaga wykonania badań w oparciu o spektroskopię w podczerwieni. Można wnioskować, że woda pełni rolę bardzo słabego katalizatora zasadowego. Spadek stężenia zasady sodowej powoduje, że większą rolę zaczynają odgrywać inne jony obecne w mieszaninie reakcyjnej. Zaproponowany model matematyczny może być z powodzeniem stosowany do opisu szybkości tej reakcji do momentu przereagowania połowy substratów (do czasu połowicznej przemiany).