

OBSAH

1. ÚVOD	7
2. STECHIOMETRIE. KINETIKA ELEMENTÁRNÍ REAKCE	10
2.1 Rozsah reakce v obecném případě jedné reakce	11
2.1.1 Konverze klíčové složky	12
2.2 Rozsah reakce (stupeň přeměny) v obecném případě soustavy reakcí	13
2.2.1 Selektivita, výtěžek	16
2.3 Reakční rychlosť.....	17
2.3.1 Rychlosť vzniku (zániku) složky	18
2.3.2 Specifická (měrná) reakční rychlosť	19
2.3.3 Závislosť rychlosťi elementární reakcie na teplotě a složení	20
2.3.4 Srážková teorie	24
2.3.5 Teorie absolutných reakčných rychlosťí	28
2.4 Termodynamika a kinetika	30
2.4.1 Rovnováha a reakční kinetika	30
3. MODELY IDEÁLNÝCH IZOTERMNÍCH CHEMICKÝCH REAKTORŮ.....	33
3.1 Látkové bilance v soustavách s chemickou reakcí.....	33
3.2 Izotermní vsádkový ideálně míchaný reaktor (BATCH)	35
3.3 Izotermní průtočný ideálně míchaný reaktor (CSTR).....	37
3.3.1 Ustálený stav	40
3.4 Polovsádkový reaktor.....	41
3.5 Průtočný reaktor s pístovým tokem (PFR).....	41
3.5.1 Ustálený stav	42
4. KINETIKA SLOŽITÝCH REAKCÍ	45
5. BILANCE ENERGIE V REAGUJÍCÍCH SOUSTAVÁCH	61
5.1 Ideálně míchaný vsádkový reaktor	64
5.1.1 Konstantní celkový tlak (izobarický reaktor)	66
5.1.2 Konstantní celkový objem (izochorický reaktor)	66
5.2 Ideálně míchaný průtočný reaktor	69
5.2.1 Ustálený stav	70
5.3 Průtočný reaktor s pístovým tokem	73
5.3.1 Ustálený stav	75
6. HETEROGENNÍ REAKCE.....	77
6.1 Nekatalytické heterogenní reakce	77
6.1.1 Heterogenní nekatalytické reakce v soustavě plyn – kapalina	78
6.1.1.1 Kinetika absorpce pseudopravního řádu	84
6.1.1.2 Limitní rychlosť absorpce	85
6.1.1.3 Obecný případ absorpce s nevratnou reakcí 2. řádu	87
6.1.1.4 Reaktor s heterogenní reakcí plyn-kapalina	88
6.1.2 Heterogenní nekatalyzované reakce v soustavě tekutina-pevná látka	90
6.1.2.1 Reaktor s nekatalytickou heterogenní reakcí plyn-pevná látka	98
6.2 Katalytické reakce	103
6.2.1 Homogenní katalýza	106
6.2.2 Heterogenní katalýza	112

6.2.2.1	Kinetika katalytických reakcí na ideálním katalytickém povrchu	114
6.2.2.2	Vliv přenosu hmoty a tepla na rychlosť heterogenní katalytické reakcie	126
7.	NEIDEÁLNÍ TOK.....	162
7.1	Rozdelení doby zdržení v kaskádě ideálně míchaných reaktorů	163
7.2	Rozdelení doby zdržení v případě pístového toku s axiální disperzí.....	168
7.3	Rozdelení stáří tekutiny v reaktoru a doby dosažení výstupu	173
7.4	Konverze klíčové složky v reaktoru s neideálním tokem tekutiny	175
7.4.1	Částice tekutiny bez interakce s okolím (segregovaný tok)	175
7.4.2	Dokonale promíchavané okolí částice tekutiny	177
7.4.3	Konverze klíčové složky v reaktoru s axiální disperzí.....	180
8.	LITERATURA	184
9.	DODATKY	186
9.1	Odvození Gibbsovy-Duhemovy rovnice.....	186
9.2	Makra GAUSSI1 a SIRK42	189
9.3	Odhad parametrů v kinetických modelech metodami nelineární regrese	193
9.4	Odhady binárních difuzních koeficientů v plynné fázi	196