

	Seznam symbolů	10
1	MIKROKINETICKÉ A MAKROKINETICKÉ VLASTNOSTI	19
1.1	Zdroje informací pro technické řešení problému	19
1.2	Co je matematický model?	21
1.3	Metodické cesty k získání matematického modelu	22
1.4	Co je to systém?	25
1.5	Mikrokinetické a makrokinetické prvky	27
1.6	Princip přenosu dat	28
1.7	Kdy považujeme dva objekty za sobě podobné?	30
	Literatura	31
2	CHEMICKÁ ROVNOVÁHA	32
2.1	Co to je rovnovážné složení a rovnovážný stupeň přeměny?	32
2.2	Ovlivňování rovnovážného složení	33
2.2.1	Ovlivňování rovnovážného složení u reakcí v plynné fázi	33
2.2.2	Posunování rovnovážného složení u reakcí v kapalné fázi	37
2.3	Získávání údajů o rovnovážných složeních	38
	Literatura	39
3	REAKCE V JEDNOFÁZOVÉ REAKČNÍ SMĚSI	40
3.1	Rychlostní rovnice	40
3.1.1	Definice reakční rychlosti, rychlosti vzniku látky a tepla	40
3.1.2	Rychlostní rovnice jednoduché reakce	41
3.1.2.1	Nevratná jednoduchá reakce	42
3.1.2.2	Jednoduchá vratná reakce	48
3.1.3	Složité reakce a soustavy reakcí	50
3.1.3.1	Obecný postup sestavování rychlostních rovnic soustav reakcí	51
3.1.3.2	Nezávislé reakce	53
3.1.3.3	Bočné reakce	55
3.1.3.4	Následné reakce	57
3.1.3.5	Řetězové reakce	61
3.1.4	Vliv vstupního složení směsi na výtěžek	63
3.1.5	Obor platnosti empirických rychlostních rovnic	66
3.2	Vliv teploty na reakční rychlost	69
3.2.1	Vliv teploty na rychlost elementárního kroku v oblasti ideálního chování	69
3.2.2	Vliv teploty na rychlost jednoduché reakce v neideální směsi	70
3.2.3	Vliv teploty na rychlost vratné reakce	71
3.2.4	Závislost reakční rychlosti vratné reakce na teplotě při konstantním stupni přeměny	75
3.2.5	Vliv teploty na výtěžek	78

3.3	Výběr rozpouštědla pro provedení reakce	79
3.3.1	Úloha rozpouštědla v chemickém reaktoru	79
3.3.2	Vliv rozpouštědla na rychlostní konstantu	80
3.3.3	Vliv kyselosti prostředí na rychlost reakce	84
3.4	Základní typy chemických reaktorů	86
3.4.1	Typy reaktorů, v nichž se neuplatní makrokinetické vlastnosti reaktoru	88
3.4.1.1	Vsádkový izotermní míchaný reaktor	90
3.4.1.2	Průtočný izotermní trubkový reaktor s pístovým tokem	93
3.4.1.3	Průtočný izotermní míchaný reaktor	100
3.4.1.4	Adiabatické reaktory s ideálním mícháním nebo pístovým tokem	104
3.4.1.5	Násobné stavy průtočného míchaného adiabatického reaktoru a jejich stabilita	113
3.4.2	Reaktory, v nichž se uplatňuje vliv makrokinetických vlastností soustavy	116
3.4.2.1	Prostup tepla stěnou reaktoru	117
3.4.2.2	Vsádkový dokonale míchaný reaktor s výměnou tepla	121
3.4.2.3	Průtočný trubkový reaktor s výměnou tepla	135
3.4.2.4	Průtočný dokonale míchaný reaktor s výměnou tepla stěnou	139
3.4.2.5	Polokontinuální míchaný reaktor s výměnou tepla stěnou	144
3.4.2.6	Reaktory s neideálním tokem a neideálním mícháním	147
3.4.3	Výběr typu reaktoru pro technické provedení reakce	150
3.4.3.1	Volba výstupního stupně přeměny	150
3.4.3.2	Pracovní teplotní oblast reaktoru	155
3.4.3.3	Technologické vlastnosti reaktorů	157
3.4.4	Optimalizace teplotního režimu reaktoru	160
3.5	Získávání kinetických dat pro návrh reaktoru	164
3.5.1	Čím začít při studiu kinetiky?	165
3.5.2	Analytické metody používané ke studiu kinetiky	167
3.5.3	Laboratorní reaktory pro studium kinetiky	170
3.5.3.1	Reaktory pro pomalé reakce	172
3.5.3.2	Reaktory pro rychlé reakce	175
3.5.3.3	Laboratorní adiabatické reaktory	176
3.5.4	Vyhodnocování kinetických dat	178
3.5.4.1	Hodnocení spolehlivosti dat	179
3.5.4.2	Odhad rychlostní rovnice	182
3.5.4.3	Použití statistických a optimalizačních metod při vyhodnocování dat	185
3.5.5	Určování adiabatického teplotního vzrůstu, měrného tepla a reakčního tepla	193
3.5.6	Výzkum rychlých reakcí	194
3.6	Schematické příklady výpočtů	195
3.6.1	Diferenciální izotermní data a jejich využití	196
3.6.2	Integrální izotermní data a jejich využití	202
3.6.3	Adiabatická diferenciální data	205
3.6.4	Adiabatická integrální data	207
3.6.5	Vyhodnocování údajů o tepelných projevech reakce a o výměně tepla	208
3.6.6	Výpočty reaktorů za použití rychlostní rovnice	212

Literatura	218
4 REAKCE NA TUHÝCH KATALYZÁTORECH	220
4.1 Princip působení katalyzátorů	220
4.1.1 Složky technických katalyzátorů a jejich funkce	221
4.1.2 Aktivní složky technických katalyzátorů	222
4.1.3 Nosiče používané v technických katalyzátorech	223
4.1.4 Příprava katalyzátorů	224
4.1.5 Požadavky kladené na technický katalyzátor	225
4.1.6 Deaktivace katalyzátoru	227
4.2 Mikrokinetické a makrokinetické vlastnosti katalytických reaktorů	227
4.3 Rychlostní rovnice používané v heterogenní katalýze	230
4.3.1 Definice reakční rychlosti v heterogenní katalýze	230
4.3.2 Empirické rovnice v katalýze	230
4.3.3 Rovnice založené na představě o mechanismu	231
4.3.3.1 Popis adsorpčních rovnováh na homogenním povrchu	231
4.3.3.2 Popis chemické rovnováhy na homogenním povrchu	234
4.3.3.3 Rychlostní rovnice adsorpce, desorpce a povrchové reakce na homogenním povrchu	235
4.3.3.4 Rychlostní rovnice katalytické reakce jako celku	237
4.3.4 Závislost reakční rychlosti na stupni přeměny katalytické reakce	240
4.3.5 Vliv tlaku na rychlost katalytické reakce	244
4.3.6 Vliv inertů na rychlost katalytické reakce	245
4.3.7 Vliv teploty na rychlost katalytické reakce	245
4.3.8 Časové souřadnice v katalytických reaktorech	247
4.4 Vliv přenosu hmoty a tepla uvnitř zrna katalyzátoru na průběh katalytické reakce	250
4.4.1 Kvalitativní výklad vlivu vnitřní difúze na průběh katalytické reakce	250
4.4.2 Mechanismus difúze látek zrnem katalyzátoru	256
4.4.3 Představy o textuře zrn katalyzátoru	259
4.4.4 Matematický model pro popis vlivu vnitřní difúze na reakční rychlost	261
4.4.5 Rovnice popisující difúzi se současnou reakcí	262
4.4.6 Metody určování efektivního difúzního koeficientu	266
4.4.7 Praktická využitelnost teorie	267
4.4.8 Výběr vlastností katalyzátoru pro průmyslové použití	269
4.4.9 Způsoby snižování vlivu vnitřní difúze	269
4.4.10 Příklady	271
4.5 Vliv přenosu hmoty a tepla mezi vnějším povrchem zrna katalyzátoru a proudem reakční směsi na průběh katalytické reakce	273
4.5.1 Kvalitativní výklad vlivu vnějšího přenosu tepla a hmoty na katalytickou reakci	274
4.5.2 Výpočet koeficientů vnějšího přestupu tepla a hmoty	280
4.5.3 Matematický model reakce s vnějším přenosem hmoty a tepla	284
4.5.4 Chování reakce ovlivněné vnějším přenosem	290
4.5.5 Vliv vnějšího přenosu na spolehlivost přenosu dat	294

4.5.6	Důsledky vlivu vnějšího přenosu na spolehlivost výběrových testů při vývoji katalyzátorů	296
4.5.7	Zásahy směřující k vyloučení vlivu vnějšího přenosu v provozním reaktoru	297
4.6	Katalytické reaktory	298
4.6.1	Klasifikace katalytických reaktorů	298
4.6.1.1	Vsádkový a kontinuální katalytický reaktor	298
4.6.1.2	Průtočný reaktor s pístovým tokem a reaktor dokonale promíchávaný	298
4.6.1.3	Způsob uložení katalyzátoru v reaktoru	302
4.6.1.4	Klasifikace katalytických reaktorů podle tepelné bilance	303
4.6.2	Tlaková ztráta reaktoru se stacionární vrstvou katalyzátoru	306
4.6.3	Adiabatické reaktory	312
4.6.3.1	Výkon adiabatického reaktoru se stacionární vrstvou katalyzátoru	312
4.6.3.2	Použití adiabatických reaktorů	315
4.6.4	Katalytické reaktory s výměnou tepla	320
4.6.4.1	Mechanismus sdílení tepla v katalytických reaktorech	320
4.6.4.2	Matematický model katalytického reaktoru s výměnou tepla	323
4.6.4.3	Přenašeče tepla a konstrukce teplosměnných okruhů	329
4.6.4.4	Rychlost výměny tepla a teplotní profil kontaktní trubky	333
4.6.5	Reaktory pro systém katalyzátor–kapalina–plyn	337
4.6.5.1	Transport vodíku	338
4.6.5.2	Reaktory pro hydrogenace látek v kapalně fázi	340
4.6.6	Fluidační reaktory	347
4.6.7	Strategie návrhu katalytického reaktoru	354
4.6.7.1	Výběr typu reaktoru	356
4.6.7.2	Podrobný návrh pracovního režimu a geometrie reaktoru	362
4.6.7.3	Význam deaktivace katalyzátoru v návrhu reaktoru	366
4.7	Získávání kinetických údajů katalytických reakcí	369
4.7.1	Úkoly technologického výzkumu v heterogenní katalýze	369
4.7.2	Postup výzkumu při hledání nového katalyzátoru	371
4.7.3	Laboratorní reaktory určené ke studiu kinetiky katalytických reakcí	372
4.7.3.1	Reaktory pro reakce v kapalně fázi	372
4.7.3.2	Reaktory pro reakce v plynně fázi	378
4.7.4	Postup při studiu kinetiky katalytické reakce	395
	Literatura	399
5	REAKCE MEZI PLYNEM A KAPALINOU A REAKCE MEZI DVĚMA KAPALNÝMI FÁZEMI	402
5.1	Rovnováha rozpouštění plynů v kapalinách	406
5.2	Reakční rychlost v systémech plyn–kapalina	409
5.2.1	Teorie prostupu hmoty fázovým rozhraním	409
5.2.2	Rychlost rozpouštění plynů v kapalinách	411
5.2.3	Nekonečně rychlá nevratná reakce	411
5.2.4	Chemická reakce je nejpomalejším dějem	414
5.2.5	Rychlost chemické reakce a rychlost sdílení hmoty jsou souměřitelné	416
5.2.5.1	Rychlá reakce prvního řádu probíhající v kapalném filmu	417

5.2.5.2	Středně rychlá nevratná reakce prvního řádu	420
5.2.5.3	Rychlá bimolekulární reakce druhého řádu	426
5.2.6	Selektivita při absorpci plynů spojené s chemickou reakcí	429
5.2.6.1	Paralelní reakce	429
5.2.6.2	Následné reakce	429
5.3	Navrhování reaktorů pro systém plyn–kapalina	432
5.3.1	Kolony se zkrápěnou náplní	436
5.3.2	Reaktory s probublávanou vrstvou kapaliny	439
5.3.2.1	Měrný mezifázový povrch a konstrukce reaktoru	440
5.3.2.2	Koeficient přestupu hmoty	449
5.3.2.3	Axiální promíchávání ve věži s probublávanou kapalinou	451
5.3.2.4	Chlazení reaktoru	454
5.3.2.5	Strategie návrhu reaktoru s probublávanou vrstvou kapaliny	455
5.4	Reakce mezi dvěma kapalnými fázemi	462
5.4.1	Reakční fáze	463
5.4.2	Velikost mezifázového povrchu	465
5.4.3	Prostup hmoty fázovým rozhraním	466
5.4.4	Reaktor s míchadlem	467
5.5	Data	469
5.5.1	Výpočet difuzivity plynů v kapalinách	470
5.5.2	Měření kinetických dat	470
5.5.3	Modelování probublávané vrstvy kapaliny	471
5.5.4	Modelování příkonu míchacího zařízení	474
	Literatura	475
6	REAKCE TUHÝCH LÁTEK S TEKUTINAMI	477
6.1	Děje, které ovlivňují průběh reakce tuhé látky s tekutinou	477
6.2	Návrh režimu aktivace, pasivace a regenerace katalyzátoru	479
	Literatura	481
	Významnější monografie o chemických reaktorech	482
	Rejstřík	484