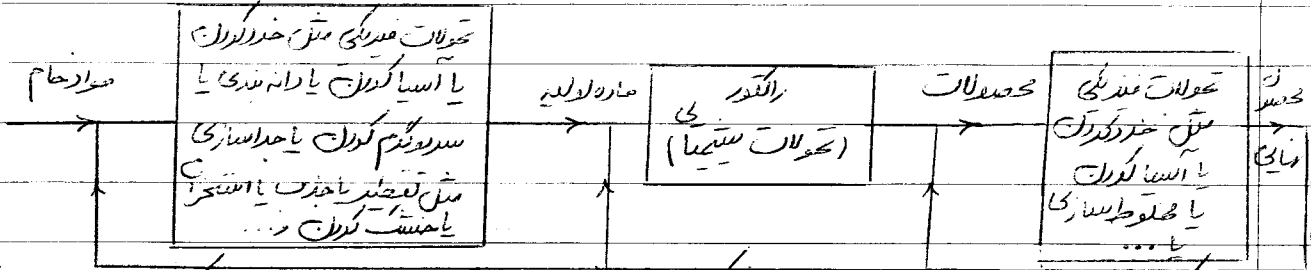


جلسه اول

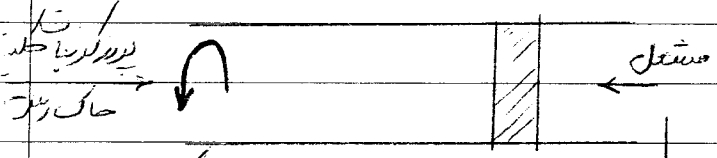
در صنعت شیمیایی :



در راندهای شیمیایی بدنام ها شکسته می شود و آنرا از سبیل می روند و پس از آن در جاهای شیمیایی جدید به صورتی دیگر و در شکل همین عوطف می شود.

مثلاً در صنعت شیمیایی :

در ابتدا طی انتخاب مواد خام از کوره ها و مخازن بدست می آید که این مواد وارد مراحل تولید مواد اولیه می شود که این مواد که شامل کربنات کلسیم و سیمان است می باشد و در کوره می شود.



مثلاً کربنات کلسیم (محصول کوره) کلسیم = همان سیمان صفتی بصورت گلوله های محکم

و کوره حجم کندی است که در آن واکنش شیمیایی اتفاق می افتد. به نوع حجم کنترل و سیستم : سیستم بسته و سیستم باز (حجم کنترل) و کوره یا پوسته یا batch همان سیستم بسته است که در آن واکنش شیمیایی اتفاق می افتد و حجم کندی که در آن واکنش شیمیایی اتفاق می افتد را کوره جریان یا پوسته نامیده می شود.

اولی از اینها ماده در کوره batch است. از خصوصیات مطلوب و کوره batch این است که فیلدینگ است و برای تولید یک ماده بطور دائم مطلوب نیست و برای این کار از کوره جریان استفاده می کنیم.

مواد اولیه را که در کوره batch می بریزیم پس از آن زمان می بردیم تا محصولات بوجود بیاید و واکنش محصولات $\rightarrow A$ را در کوره batch در نظر بگیریم :

در آنطور موازنه ها را اصولی می نویسیم :

$$N_{A_0} = N_A \Big|_{t=0}$$

$$N_A \Big|_t = N_A(t)$$

پاداش N_A در هر لحظه می توان میزان مواد اولیه مصرف شده در برایت N_A در هر لحظه (اصلی یعنی میزان محصول تولید شده در هر لحظه) وقت شود که در آنطور تولید محصول نظیر نانو لانت می باشد (تصویر خطی نیست).

هدف : در هر لحظه میزان محصول داریم یا برای تولید میزان مشخص از یک محصول چه مدت زمان درجه X_A (درجه است زمان)

$$X_A = \frac{N_{A_0} - N_A}{N_{A_0}} = X_A(t)$$

$$\Rightarrow N_A = N_{A_0} (1 - X_A)$$

در آنطور جریان :

محصول $A \rightarrow$

مواد اولیه	آنطور جریانی	محصولات
$F_{A_0} \text{ (kg نیروی)}$		F_A

آنطورهای جریانی بصورت S.S.F کار می کنند و مواد اولیه پس از ورود به آنطور به انواع F_A تبدیل می شود (در واقع هر نقطه از فصل یک خط از فصل را هم نشان می دهد)

$$X_A = \frac{F_{A_0} - F_A}{F_{A_0}}$$

هدف : محاسبه X_A بر حسب فصل

در مورد هر دو نوع بر آنطور دو سوال مطرح می شود :

سوال اول : اصولاً در آنطور چه تبدیلی می تواند صورت بگیرد ؟

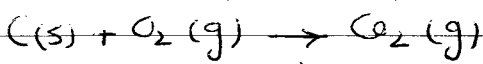
حدهای ای را می توان از هر ماده ای به دست آورد پس باید ابتدا فهمید که یک ماده بالقوه توانایی تبدیل به چه ماده ای را دارد که در این مرحله عدم تشخیص نظر می رود. اگر با بررسی این مرحله یک سوال کیفی است و پس از این مرحله هر دو نوع تبدیلی که مورد نیاز است در آن محصول قوی تر از آن مواد اولیه می دهد که این یک پاسخ کلی است.

دوم شود محاسبه X_A با بزرگ نسبت مگر برای واکنش های با طرفه می دانیم پس از فصل مقدار N_A مصرفی شود که این حالت کاملاً فرضی ایده آل است.

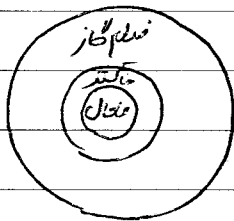
محاسبه X_A در واقع محاسبه N_A را می دهد.

سوال دوم - این تغییرات با چه سرعتی صورت می گیرد ؟
 در رأس این مدخله سرعت انجام واکنش است (تسک واکنش) که علم شیمی فیزیک
 مورد نیاز می شود.

بنابراین هم در این است که سرعت واکنش تابع شرایط عملیاتی از جمله دما باشد و دما تابع انتقال
 انتقال حرارت است پس علم انتقال حرارت مورد نیاز است و انتقال حرارت تابع
 سرعت است و Re و Pr مطرح می شوند.
 همچنین انتقال هم در طرح رآکتور ناچگن است - در ساینس و انجمن مهندسی است

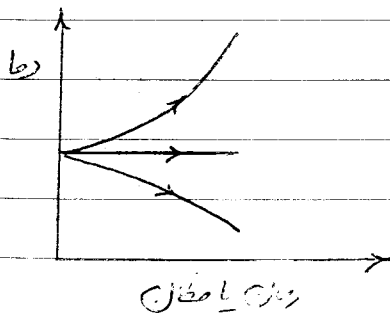


در حال برای سوختن در اطراف آن یک فیلم گاز تشکیل میشود برای سوختن زغال از هوا استفاده
 می شود و این فیلم عاقل بین آتش برای سوختن است سطح زغال باید از زغال سوختن عبور کند
 پس از حالت اطراف زغال عبور نماید پس برای انجام واکنش ابتدا دو ماده (انتقال هم
 داریم و بعد در حوضه زغال واکنش صورت میگیرد.



دما نسبت به زمان یا مکان چه تغییری می کند ؟

بسی از فیزیک و طایف فیزیک شیمی نظام شرایط عملیاتی از جمله دما و واکنش است
 دما نسبت به نوع واکنش گاهی باید ثابت بماند و حال در چه عددی باید ثابت ماند ؟
 بعضی مواقع صلاح در این است که دما افزایش یابد یا کاهش یابد و این را چه عددی ؟
 خط یا منحنی دما در حوضه زغال یا مکان و $Operating\ curve$ نامیده می شود که در حوضه
 نسبت آورده $Optimum\ operating\ curve$ است.



چه لزومی برای تغییر دما یا ثابت نگه داشتن آن در مقدار
 در حوضه داریم ؟ عیال انرژی و برای این کار فقط
 یک عدد انرژی داریم (در دمای انرژی می گوئیم چه
 مقدار اگر ما باید مصرف شود تا به مسیر واکنش مقدر نظر
 برسیم)

مثلاً صلاح در این است که در یک زمان یا مکان مشخص به دمای خاصی برسیم زیرا قبل از

لأن التفاعل (حما الأستيل على ايد ليد 30 فيل ران اصل) - موقد - استت

لأن طار در ابتدا باير لگوای و الیش (بیک ترمودینامیک) مستخدم شود که خود الیش لگوای است یا لگوای 13

$$\Delta H_r = \frac{\text{گرمای ترمودینامیکی}}{\text{واحد اصل}}$$

$$Q_r = \Delta H_r \times R \times V$$

لگوای و الیش یک حجم از مواد انرژی است - محاسبه گرمای واکنش -

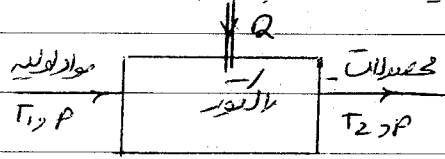
جدید شده‌های جداگانه تشکیل می‌شود انرژی آزاد می‌کند و در نتیجه انرژی می‌کند

تعریف تبادلی یا علی لگوای و الیش: Q_1 / منفی انرژی در بسته $Q_2 \times$
 لگوای و الیش = (مجموع انرژی بسته‌های تشکیل شده) - (مجموع انرژی بسته‌های تسخیر شده)
 جهت رعایت مقادیر لا محولی ترمودینامیک مجموع انرژی بسته‌های تسخیر شده که در حال لگوای ترمودینامیک است در نظر گرفته شده و در ابتدا آمده است

الیش لگوای (۱) > (۲) < ۰ → لگوای و الیش
 الیش لگوای (۱) < (۲) > ۰ ← لگوای و الیش

فرض کنید یک موتور حرارتی داریم که مواد اولیه را در T_1 و P وارد می‌شود و در T_2 و P خارج می‌شود. بگوئید T_2 بیشتر است یا T_1 !

در ابتدا باید معلوم شد که موتور عاقل است یا غیر عاقل و تعیین شود چه مقدار لگوای داریم



اگر عاقل باشد $T_2 < T_1$ یا $T_2 > T_1$ → حالت حاصل $Q = 0$
 برای لگوای منفی / برای لگوای مثبت / در مثال Q جنگی دارد

اگر عاقل نباشد $T_2 > T_1$ و لگوای T_2 هم می‌تواند بیشتر باشد و هم کمتر باشد که در این حالت اول ترمودینامیک لازم می‌شود

در موتورها معمولاً کار به عمل می‌آید ΔE_p و ΔE_k تا جدید

$$S.S \Rightarrow Q = \Delta H = H_{\text{محصولات}}(T_2, P) - H_{\text{مواد اولیه}}(T_1, P)$$

(این رابطه برای موتور batch در حالت ثابت حجم صادق است) یا معلوم شد که T_2 معلوم می‌شود یا بالعکس که در هر صورت یک حجم برای داریم. می‌تواند Q مثبت یا منفی یا صفر یا لگوای و الیش در این رابطه مبرق می‌کند

$$Q_{\text{Reaction}} = Q_R$$

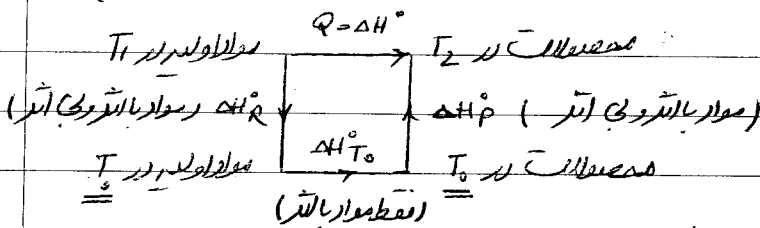
کمی باشند در نتیجه می توانیم گرمای واکنش تابع صغیری از دما و یا صغیری از دما و یا صغیری از دما و یا صغیری از دما

سوال: در محاسبات انجام شده مواردی اندک جری (تقریباً گرمای واکنش) در واکنش در واکنش (مثلاً در سوختن) لظن از جهات استفاده می کنیم و می توانیم حالتی را نیز (است) مواردی اثر بر روی گرمای واکنش اثر ندارد چون گرمای حاصل واکنش در وسط مواردی است که در واکنش شدت می کنند بر موارد اولی و هم در محاسبات

در صورت:

محصولات در T_2 (در T_1) \xrightarrow{Q} مواد اولیه در T_1
 در صورت در کل مواردی اندک داریم در واکنش حاصل می شود.
 برای محاسبه Q از قانون اول در 3.5.5.5 داریم:

$$Q = \Delta H^\circ$$



در این جا گرمای واکنش نداریم بلکه گرمای بالابردی داریم

محاسبات مانند حالت قبل است مگر در این جا مواردی اندک داریم

$$Q = \Delta H_R + \Delta H_{T_0} + \Delta H_p$$

تفاوتی نیست با واکنش 8

- ۱- دمای ورودی و خروجی یکسان نیست
- ۲- وجود مواردی اندک
- ۳- واکنش حاصل در حد صغیری می روند
- ۴- در هر حد فقط موارد بالابردی ممکن است چند واکنش با هم بشود و دیگر در این صورت باید مجموع آنها را در نظر بگیریم
- ۵- موارد در صورت به نسبت است و کم و بیش می باشد

پاسخ سوال اول: در واکنش هم تغییراتی می تواند صورت بگیرد

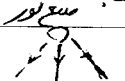
بسی از پاسخ کتبی: پاسخ کمی تغییر داریم: یا اصول A می توانی اصول B بدست آورد

حداکثر واکنش حاصل در کل دو طرف هستند و غیر تعالی. دو طرف اولی هم معنی تعالی بودی نیست

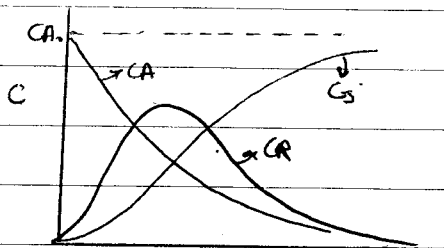
حساب نوزدهم

فصل هشتم:

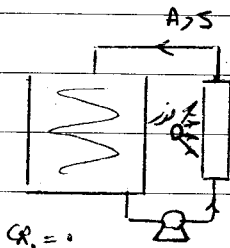
والفشر زبور اور نظری الکتریم کم دریک سیدر صورت کی کسیر و فرض بر این است که این و الفشر نسبت به نوزده مسائل است (والفشر نوزده است) سین الکتریم بر این سیستم بنامینم بطور کیفی می توان گفت A را با از سین می رود و R تبدیل می شود و S = R. در زمان ۰ تمام A حساب R و R حساب S تبدیل می شود.



$C_R = 0$
 $C_S = 0$

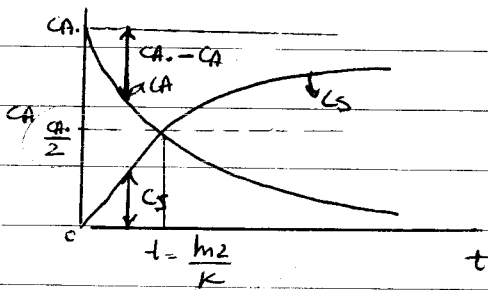


با آسین نوزده نسبتاً R (S) وجود ندارد و A و R تبدیل می شود و R در ابتدا خیلی کم است و در اوج والفشر نسبت مقدار زیاد A، A برنده است و با اصل برادری نسبت به جنر A است و R نسبت به R تبدیل می شود و در اصل صرف مالزیم مقدار R است حال الکتریم آسین نوزده عوض کنیم:



$C_R = 0$
 $C_S = 0$

در بیشتر حالت کوهایی متلازم هم وجودات را به طوف ریزی منتقل کرده و در آن حالت را بنامینم. A به طرف دوم منتقل شده و حین مقابله کم است با آسین نوزده R و R که تبدیل می شود و R خارج می شود و با



درشت زمان A و R خارج می شود (در زمان خیلی زیاد هم خارج می شود) و (روافع R) تولید می شود. S بر این است با CA - CA سین آسین نسبت به طور CA/2 قریب اند. $C_R \approx 0$

در این حالت دوم صد درصد به جنر حالت.

در حالت دوم در حین با دو تبدیل مقابله با هم مخلوط می شود و در حالت اول حین نسبت سین نوزده بنامینم الکتریم های سری که با محلات با تبدیل های مختلف همراه است. کلاً به جنر با مشاهده بود.

در صورت والفشر سری با است: (همواره بالا) هیچ مقدار است از Mix چون در Mix محلات از نظر تالیف اصول مطلوب.

و R تولیدی نبود

و مصرفی بابت برای تفاوت و محدود دارد (مصارف سوازی) همین نبود

بسیار حساس فصل هشتم : ۲۲ - ۲۰ - ۱۴ - ۱۰ - ۷ - ۶
 (ارتقا - عدد ۱) فصل نهم : ۲۳ - ۲ - ۱۴ - ۱۲ - ۹ - ۵
 فصل دهم : ۱۳ - ۸ - ۳ - ۱ (مسئله ۱)

بحث کلی :
 الف - الف - الف batch :

$$\begin{cases} -\frac{dCA}{dt} = k_1 CA \\ \frac{dCR}{dt} = k_1 CA - k_2 CR \\ \frac{dCS}{dt} = k_2 CR \end{cases}$$

$$CA + CR + CS = CA + CR + CS = CA \Rightarrow CS = CA - CA - CR$$

همان مقدار داریم که می آید غیر مستقل است

$$\frac{CA}{CA_0} = e^{-k_1 t}$$

همان حالت تبدیل فریبی همان است

$$\frac{CR}{CA_0} = \frac{k_1}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}) \quad \text{شرط } k_1 \neq k_2$$

$$\frac{dCR}{dt} = 0 \Rightarrow t_{max} = \frac{\ln(k_2/k_1)}{k_2 - k_1} = \frac{1}{k_1 \log_{k_2/k_1}}$$

$$\frac{CR_{max}}{CA_0} = \left(\frac{k_1}{k_2} \right) \frac{k_2}{k_2 - k_1}$$

$k_1 = k_2$ (مساوی) :

$$\frac{CA}{CA_0} = e^{-k_1 t}$$

$$CR = k_1 CA_0 t e^{-k_1 t}$$

$$t_{max} = \frac{1}{k_1}$$

$$\frac{CR_{max}}{CA_0} = \frac{1}{e} = 0.3679 \approx 0.37$$

$$t = t_{max} = \frac{1}{k_1} \xrightarrow{\text{مادامی که } CA \text{ در } t_{max} \text{ باشد}} \frac{CA}{CA_0} = \frac{1}{e} = 0.37$$

$\frac{CR_{max}}{CA_0}$ همان مقدار (هم مقدار) $\frac{CA}{CA_0}$ در t_{max} دارد (هم مقدار) CR در t_{max} همان مقدار است

راخواه در راست :

وقتی $k_2 = k_1$ معنی $\frac{CA}{CA}$ از طرف هم معنی CR می گردد و بدون نقطه ماکزیم هم $\frac{1}{e}$ است

ب - التور plug :

$$\frac{CA}{CA} = e^{-k_1 \tau}$$

$$\frac{CR}{CA} = \frac{k_1}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 \tau} - e^{-k_2 \tau})$$

در التور پلاگ برای t_{max} از ح استم استفاده می شود
 t_{opt} یعنی ح ای که حاصل مطلوب نسبت تورتور می شود و همان t_{max} است و تورتور را در

$$t_{opt} = \ln \frac{k_2/k_1}{k_2 - k_1} \Rightarrow \frac{CR_{max}}{CA} = \left(\frac{k_1}{k_2} \right)^{\frac{k_2}{k_2 - k_1}} \quad \text{نسبت } k_2 + k_1$$

$$CS = 1 - \frac{CA}{CA} - \frac{CR}{CA} \quad *$$

فرض کنیم $k_1 = k_2$: $\frac{CR_{max}}{CA} = \frac{1}{e}$

$$t_{opt} = \frac{1}{k_1} \Rightarrow k_1 t_{opt} = 1$$

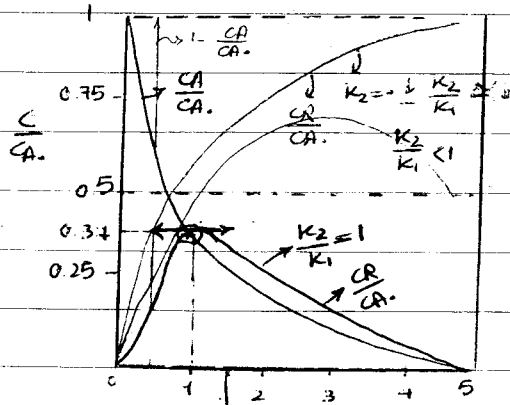
$$\frac{CA}{CA} \Big|_{t_{opt}} = \frac{1}{e} = 0.37$$

در کتاب شکل 3a

$$k_1 \tau = 1 \Rightarrow \frac{CA}{CA} = ?$$

$$\frac{k_2}{k_1} = 1 \Rightarrow k_2 \tau = ?$$

$$\Rightarrow CR = ? \Rightarrow CS = ? \quad * \text{ ناممکن}$$



$k_2 \gg k_1$: A تورتور بیشتر در کتبک استفاده می شود

مربوط به حال CR است

$k_2 \ll k_1$: A تورتور در کتبک استفاده می شود

در مورد کولور است $CA = CR$

$CR > CA = 0.5$: ناممکن

$$\frac{CR}{CA} = \frac{CA}{CA}$$

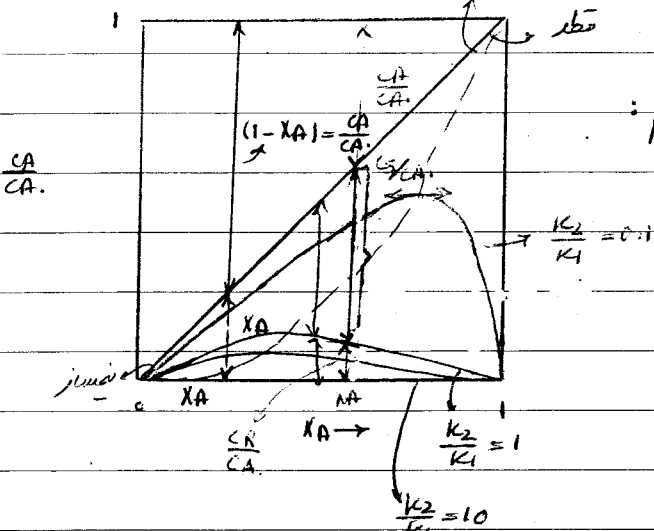
$\frac{k_2}{k_1} \gg 1 \Rightarrow k_2 \gg k_1 (CR)$

حال اگر $k_2 < k_1$ باشد یعنی هم بین (و معنی مثل تقارن کرد)
 هر چه k_2 کوچکتر شود یعنی CA است و مانع هم نسبت را است محدود.

در شکل دیگری 3b و 3c که k_1 معیاری XA را دارد (همان 3a-3 است معیار تغییر معیار را هم)

$$k_1 C \Rightarrow \frac{CA}{CA} \Rightarrow 1 - XA \Rightarrow XA = ?$$

مکان معینی CR MAX است



به ازای هر k_2 معین k_1 معین را

XA معین و به ازای CA های مختلف داریم:

هر چه XA تمام بلا عرض تا CA و CR

با قطع کند و از قطر هم در همان XA

بلا عرض تا CA را قطع کند

و حاصل CA نسبت می کند و حاصل

بین این دو CA است (XA)

هر چه k_2 بزرگتر باشد CA را بیشتر از CA تبدیل کند طوری که CA بیشتر از CA معین

ج - CA را MEF :

$$A \xrightarrow{k_1} R \xrightarrow{k_2} S$$

$$\frac{VM}{FA} = \frac{ZM}{CA} = \frac{XA}{-rA}$$

در حالت کلی

$$\varepsilon = 0 \Rightarrow ZM = \frac{CA - CA}{-rA}$$

معادله معیار

این معادله معیار برای CA است و فقط $(-rA)$ معادله معیار

$$ZM = \frac{CA - CA}{k_1 CA} \Rightarrow \frac{CA}{CA} = \frac{1}{1 + k_1 ZM}$$

معادله تغییرات CA

معادله CR :

$$ZM (R) = \frac{CR - CR}{-rR}$$

1- استنباط می توان بیان نسبت که داریم

بیان هم برای هر دو هم از CA و CA معین (برای CA نسبت است و CA معین) معادله معیار، الزام می شود

$$\tau_M = \frac{C_R - C_R}{-C_R} = \frac{C_R - C_R}{C_R} = \frac{C_R}{C_R} = \frac{C_R}{k_1 C_A - k_2 C_R}$$

حرفه گشت است (موتور)
حرفه گشت است (موتور)
حرفه گشت است (موتور)

$$\tau_M = \frac{C_R}{k_1 C_A - k_2 C_R} \Rightarrow \frac{C_R}{C_A} = \frac{k_1 \tau_M}{(1 + k_1 \tau_M)(1 + k_2 \tau_M)}$$

$$\frac{C_S}{C_A} = 1 - \frac{C_A}{C_A} \quad \frac{C_R}{C_A} = \frac{k_1 k_2 \tau_M^2}{(1 + k_1 \tau_M)(1 + k_2 \tau_M)}$$

برای $k_1 = k_2$ τ_{opt} موتور C_R موتور τ_{opt} موتور C_R موتور

$$\tau_{opt} = \frac{1}{\sqrt{k_1 k_2}} \Rightarrow C_{Rmax} = \frac{1}{C_A \left[\left(\frac{k_2}{k_1}\right)^{1/2} + 1 \right]^2}$$

نتیجه! موتور $k_1 = k_2$ batch موتور

$$k_2 = k_1 : \tau_{opt} = \tau_{opt} = \frac{1}{k_1}$$

موتور C_R موتور C_R موتور C_R موتور C_R موتور C_R موتور C_R

P.F.R $\Rightarrow \frac{C_{Rmax}}{C_A} = \frac{1}{e} = 0.37$

M.F.R $\Rightarrow \frac{C_{Rmax}}{C_A} = 0.25$

MIX موتور

$$\phi = \phi(\gamma_A) = \frac{C_R/C_A}{1 - C_A/C_A} = \frac{C_R}{C_A - C_A}$$

$$k_2 = k_1 \text{ (موتور)} \xrightarrow{\text{MIX}} \phi_M = \frac{C_A k_1 \tau_M}{(1 + k_1 \tau_M)^2} \times \frac{1}{C_A \left(1 - \frac{1}{(1 + k_1 \tau_M)} \right)} = \frac{k_1 \tau_M}{k_1 \tau_M (1 + k_1 \tau_M)}$$

$$\Rightarrow \phi_M = \frac{1}{1 + k_1 \tau_M} = \frac{C_A}{C_A} = 1 - X_A$$

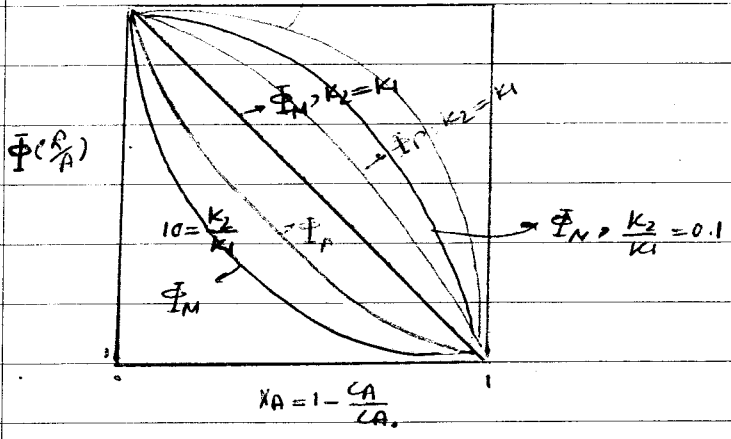
$$k_1 = k_2$$

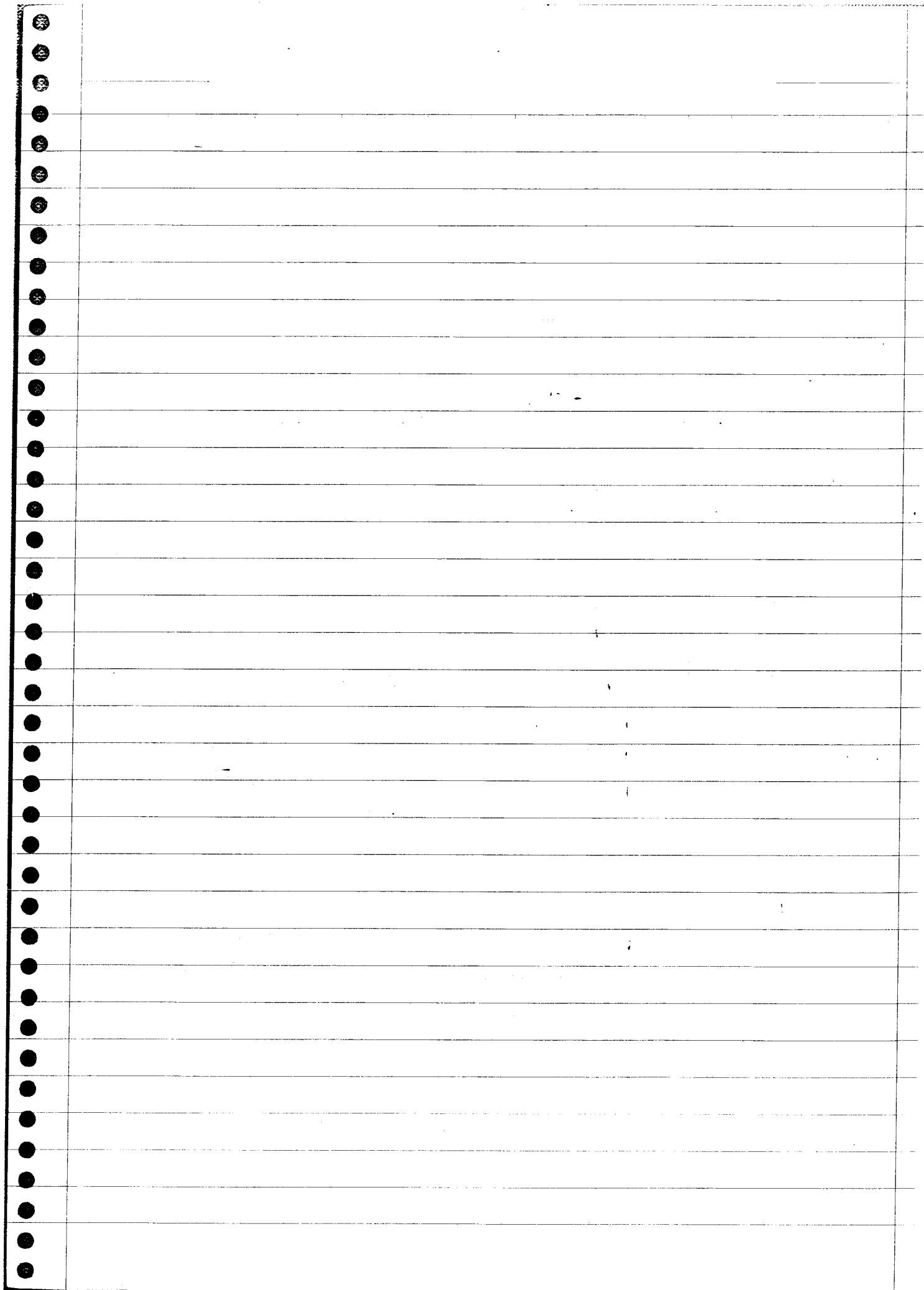
$$\Phi_M = 1 - X_A$$

برای MFR (در حالتی که) $k_2 = k_1$

وجود دارد که Φ_P بیشتر از Φ_M است و در صورتی که $k_2 < k_1$ و در نتیجه $\Phi_P > \Phi_M$ است.

$$\Phi_P > \Phi_M$$

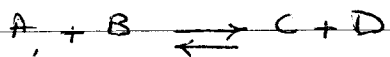




و اگر چه آنها در حال پاره شدن می باشند
 زیرا آنجا که محلول تبدیل یک نسبت (مثلاً در کاتود) پس محلول آن جقدر است
 رساننده N_A محلول باشد یعنی در محلول آنجا که در حال پاره شدن است جمع صدها

$$x_A = \frac{N_A \cdot -NA}{NA}$$

محلول در تمام محلول : محلول محلول تبدیل
 این محلول از طریق شرط لازم و کافی تعادل شیمیایی که با تعادل است در دست می آید
 محلول تبدیل فرضی محلول نسبت x_A پس محلول است
 مثلاً در واکنش زیر :



در این واکنش پیش می رود یعنی سرعت واکنش رفت بیشتر است نسبت به
 سرعت واکنش برگشتی که در سرعت واکنش برگشتی بقدری زیاد می شود تا در تعادل
 می نرسد سرعت رفت و برگشت یکی می شود و حال متوازن است محلول تبدیل را در تعادل
 داریم. F_A و F_B و F_C و F_D و x_A را می دهد که شرط لازم و کافی تعادل
 شیمیایی مورد نیاز است.

شرط لازم و کافی تعادل شیمیایی $\rightarrow x_A = x_C$

$$dG_{T,P}^t = 0$$

تعدادات : $v_1 A_1 + v_2 A_2 + \dots \rightarrow v_3 A_3 + v_4 A_4 + \dots$

در این موارد در محلول استوکیومتری حالت نسبت می دهیم
 $\frac{dn_1}{v_1} = \frac{dn_2}{v_2} = \frac{dn_3}{v_3} = \frac{dn_4}{v_4} = \frac{dn_i}{v_i} = d\varepsilon$

تعدادات تعداد مولها به نسبت استوکیومتری است و این $\frac{dn_1}{v_1}$ و $\frac{dn_2}{v_2}$ تناسب می خورند و چون در
 تعادل استوکیومتری یا محلول و واکنش یا محلول استوکیومتری است

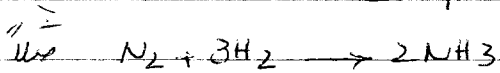
$$\Rightarrow dn_i = v_i d\varepsilon$$

ع در هر شرایطی تعادل است و مثلاً در این حالت است
 $n_i - n_i^0 = v_i \varepsilon \Rightarrow n_i = n_i^0 + v_i \varepsilon$

پس با توجه به رابطه بین مولهای سازنده در هر لحظه یک ۳ چیز است: n_i^0 (به حالتی دارد) v_i (به حالتی دارد) ϵ (به مولی دارد)

$$\sum n_i = \sum n_i^0 + \epsilon \sum v_i$$

$$\sum v_i = v$$



$$v_1 = -1, v_2 = -3, v_3 = +2 \Rightarrow v = -2$$

از آنجا که تعداد مولهای آنرا با n_I نشان می‌دهیم $n_I = \bar{n}_I = \epsilon v$

کسر مولی هر ماده $\epsilon = \frac{n_i}{\sum n_i + n_I} = y_i(\epsilon)$

* در معادله ترمودینامیک دوفاز از آنجا که در حالت اتزان می‌توانیم تغییرات را به این شکل بنویسیم:

$$dg = -s dt + v dp \quad \left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)_{p, n_i} = -s, \quad \left(\frac{\partial g}{\partial p}\right)_{T, n_i} = v, \quad \mu_i = \left(\frac{\partial g}{\partial n_i}\right)_{T, p, n_{j \neq i}}$$

$$d(nG) = -(ns) dT + (nv) dp + \sum \mu_i dn_i$$

برای دوفاز در حالت T, P :

$$d(nG)^\alpha + d(nG)^\beta = \sum \mu_i^\alpha dn_i^\alpha + \sum \mu_i^\beta dn_i^\beta = d(nG)^\dagger = 0$$

$$\Rightarrow dn_i^\alpha = -dn_i^\beta \Rightarrow \mu_i^\alpha = \mu_i^\beta$$

در این جا دوفاز در تعادل هستند و در هر دو فاز در تعادل شیمیایی یک فاز شیمیایی وجود ندارد. در تعادل شیمیایی $dn_i = v_i d\epsilon$

در تعادل شیمیایی: $d(nG) = -(ns) dT + (nv) dp + \sum v_i \mu_i d\epsilon$

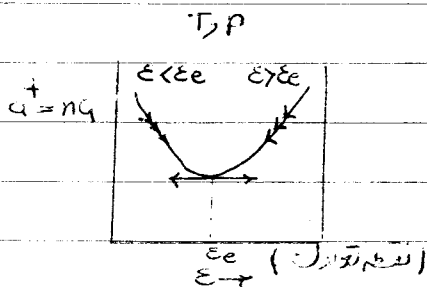
$$d(nG)^\dagger = 0 \Rightarrow \sum v_i \mu_i = 0 \Rightarrow \sum x_i \mu_i = 0$$

مثلاً: $-\mu_{N_2} - 3\mu_{H_2} + 2\mu_{NH_3} = 0$

سؤال: می‌توانیم در تعادل (در فشار بی‌نهایت) $d\epsilon$ را با پارامتر دیگری بنویسیم؟

پس سؤال از تعادل شیمیایی در حالتی دارد.

موتور ریاضی: $(nG)^\dagger$ یا g^t تابع T و P در حالت اتزان در دما و فشار ثابت با T و P ثابت، nG فقط تابع ϵ می‌شود.



بر اصل دانستیم $\sum \nu_i d n_i = 0$ در هنگام تعادل است اگر $d n_i = 0$ ^{غیر صفر}
 حال اگر برای مواد اولیه و محصولات را عوض کنیم یعنی ϵ از ϵ کمتر باشد پس واکنش پس
 سرود و برعکس واکنش عقب است، ϵ کم می شود.
 واکنش تعادلی شامل دو واکنش غیر مستقل است (درست برعکس است)

زیر قشر می بنویسیم: $\sum \nu_i \mu_i = 0 \Rightarrow \sum \nu_i \mu_i = 0$

عبارت فیدرلی: این تعادل شیمیایی مواد تعادل مازی، یک تعادل ریاضی است و استاتیکی
 نیست و ϵ در ϵ صد در صد ثابت نیست و نوسان دارد (T و P حاصله ثابتند). با تغییر
 تدریجی ϵ هم تغییر میکند (در حال انتقال حجم ϵ ثابت است).
 تغییرات ϵ را طرف ϵ در نظر حاصل صفر است

در حال متونالی و عدلی: λ_{AE} : intensive
 μ (یا $\mu_{شیمیایی}$) یک خاصیت ترمودینامیکی است و خواص ترمودینامیکی را است. تابع متغیرها
 مازی هستند.

متغیرهای مازی مستقل = توابع خواص intensive مستقل

حال باید تابع μ را بداندیم
 $\sum \nu_i \mu_i = 0 \xrightarrow[\substack{\text{حالت مازی تابع} \\ q_i = \mu_i}]{\substack{\mu_i = \mu_i(\epsilon) \\ n_i = n_{i0} + \nu_i \epsilon}} \epsilon = ? \xrightarrow{N_i \epsilon = ?} n_i \epsilon = ? \xrightarrow{\lambda_{AE} = ?}$

در این مشق در این مسیر که در تعادل مازی هم بدین صورت است یعنی تابع μ است
 که تابع μ بین شیمیایی را حذف می کنیم و فرکانس را بجای آن حالت مازی می کنیم و می در
 واقع تغییر تابع صد حجم (مویکسید قائم مقام یا بین شیمیایی است به سبب ایرانی)

$d \bar{q}_i = RT d \ln \hat{f}_i$, $\bar{q}_i = \mu_i$

$d \mu_i = RT d \ln \hat{f}_i$

^{تغییر} $\mu_i - \mu_i^0 = RT \ln \frac{\hat{f}_i}{\hat{f}_i^0}$, $\frac{\hat{f}_i}{\hat{f}_i^0} = \hat{a}_i$
_{تغییرات در حالت استاندارد}

$\Rightarrow \mu_i = \mu_i^0 + RT \ln \hat{a}_i$

$\sum \nu_i (\mu_i^0 + RT \ln \hat{a}_i) = 0$

$\sum \nu_i \mu_i^0 + RT \sum \nu_i \ln \hat{a}_i = 0$

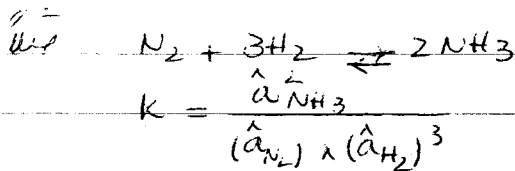
$\Delta G^0 = \sum \nu_i \mu_i^0 = \Delta H^0 - T \Delta S^0$ _{تغییر انرژی آزاد گیبس}
 $\Delta H^0 = \sum \nu_i H_i^0$ _{تغییر آنتالپی واکنش (گرمایی واکنش)}
 $\Delta S^0 = \sum \nu_i S_i^0$ _{تغییر آنتروپی آزاد گیبس}

$$\Rightarrow \Delta G^\circ = -RT \sum \ln \hat{a}_i^{\nu_i}$$

$$\Delta G^\circ = -RT \ln \Pi \hat{a}_i^{\nu_i}$$

محافظت التوتيرها بـ ν_i $K_e = K = \Pi \hat{a}_i^{\nu_i}$ = ثابت التوتيرها بـ ν_i

$$\Rightarrow \Delta G_i = -RT \ln K$$

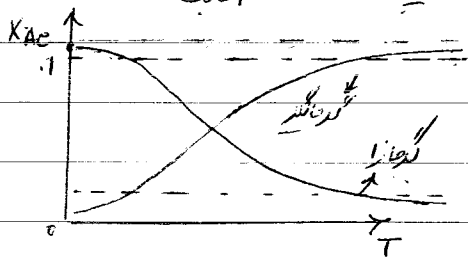


برای هر واکنشی ابتدا ΔG_i را بدست میآوریم
 این رابطه از آن مقدره است که $\Delta G_i = -RT \ln K_e$ $\Rightarrow K_e = e^{-\frac{\Delta G_i}{RT}}$ $\Rightarrow K_e = \Pi \hat{a}_i^{\nu_i}$
 ΔH° و $\Delta S^\circ \rightarrow \Delta G_i = ? \rightarrow K_e = ?$ (با ΔG_i و ΔH° و ΔS°)
 $\Delta G_i = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$
 $\Delta H^\circ = \sum \nu_i \Delta H_f^\circ$ و $\Delta S^\circ = \sum \nu_i S_i^\circ$
 $\Delta G_i = \sum \nu_i \Delta G_f^\circ$ $\Rightarrow K_e = ?$
 $\Delta G_i = \sum \nu_i \Delta G_f^\circ$ $\Rightarrow K_e = ?$

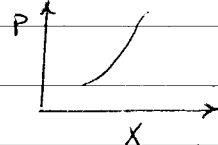
$$n_i = n_i^\circ + \nu_i \xi$$

التوتيرها تابع خواص توتيرها است (دما و فشار و ...)

در دما و فشار ثابت، تغییرات در خواص توتيرها تابع تغییرات در دما و فشار است.



$\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\xi}$ هم تابع T و ξ است.



در حالت فرضی، اگر دما و فشار ثابت باشد، تغییرات در خواص توتيرها تابع تغییرات در دما و فشار است. $K_e = ?$ و $\Delta G_i = ?$

در حالت $\Delta H < 0$ درجه حرارت ثابت معادل باید از ΔH منفی بزرگتر باشد (سرعت رفت بیشتر از سرعت برگشت است)
 درجه حرارت ثابت معادل از ΔH منفی کمتر است (والس در جهت برگشت کمی بود)
 در دماها ناچهارم و چهارم کنیم به نفع است و در دماهای دیگر هم به نفع است =

گفتیم در شرایط عملیاتی معین تابع حاصل است ولی بین خواص است تابع درجه حرارت است
 پس عملاً ΔH ثابت بود و ΔG هم تابع درجه حرارت است

ولی از نظر کمی برای کاربردهای مختلف درجه حرارت است

$$\left(\frac{\partial \Delta G}{\partial T} \right)_{P, X} = -\Delta H$$

مثلاً $\Delta H > 0$ $T \uparrow \Rightarrow \Delta G \uparrow \Rightarrow X_{Ae} \uparrow$ (در واکنش گرماگیر)

مثلاً $\Delta H < 0$ $T \uparrow \Rightarrow \Delta G \downarrow \Rightarrow X_{Ae} \downarrow$ (در واکنش گرمازا)

$$\left(\frac{\partial \Delta G}{\partial P} \right)_{T, X} = -\Delta V$$

$\Delta V > 0 \Rightarrow$ افزایش فشار $\Rightarrow \left(\frac{\partial \Delta G}{\partial P} \right)_{T, X} < 0 \Rightarrow P \uparrow \Rightarrow \Delta G \downarrow \Rightarrow X_{Ae} \downarrow$
 (در واکنش کم مولی صورت است)

$\Delta V < 0 \Rightarrow$ کاهش فشار $\Rightarrow \left(\frac{\partial \Delta G}{\partial P} \right)_{T, X} > 0 \Rightarrow P \uparrow \Rightarrow \Delta G \uparrow \Rightarrow X_{Ae} \uparrow$
 (افزایش فشار به نفع است)
N2 + 3H2 -> 2NH3

$\Delta V = 0 \Rightarrow$ تغییری در خواص ندارد

تا جایی که ممکن باشد این است که کارگر سرگرم شود و در کارگاه تولیدی است که باید تا نیاز به افزایش فشار حاصل شود

جلسه چهارم

ثابت تعادل یک واکنش تابع چیست ؟ فقط فقط تابع دماست .
 در صورتیکه هوکام است و واکنش خود را در صورتیکه هوکام است

از حاصل جمع مجموع $K_e = \prod a_i^{\nu_i}$ تابع فعالیت در حالت استاندارد (برای استاندارد تابع فعالیت استاندارد)

ΔG° حالت استاندارد (بر فشار 1 atm) است تابع فعالیت و تابع حضور و غیاب
 معادله ای اندر هم نسبت در روابط $\Delta G^\circ = -RT \ln K_e$ فقط T حضور دارد پس K_e فقط
 تابع دماست .

سوال : ثابت تعادل چه تابعی از دماست ؟ معادله ای است یا عددی ؟
 ثابت سرعت همواره تابع صورتی از دماست از رابطه آرنیوس و واکنش چه گامی است در واکنش برای
 اکثریت سرعت واکنش به این روابط همگی - قبل از انجام واکنش جهت پیش رفتن واکنش و
 تعادل رسیدن - مانده است و مثل گاز در وضعیت
 از روابط گسیب معلومند :

$$G = H - TS$$

$$\frac{\partial G}{\partial T} = \frac{H}{T} - S \xrightarrow{\text{نسبت مشتق}} \frac{\partial(G/T)}{\partial T} = T \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)^{-1} P - H - \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) P$$

$$= \frac{C_p}{T} - \frac{H}{T^2} - \frac{C_p}{T}$$

$$\frac{\partial(G/RT)}{\partial T} = -\frac{H}{RT^2} \quad G \rightarrow \Delta G^\circ \neq \# \text{ (ضشار) = ثابت متغیری نبود}$$

$$d \left(\frac{\Delta G^\circ}{RT} \right) = -\frac{\Delta H^\circ}{RT^2}$$

$$\frac{d \ln K_e}{dT} = \frac{\Delta H^\circ}{RT^2} \quad \text{معادله آرنیوس}$$

K_e تابع لوری از دماست . \rightarrow $\Delta H^\circ < 0$ مستقیم : درگرمای
 K_e تابع معکوسی از دماست . \rightarrow $\Delta H^\circ > 0$ معکوس : درگرمای

این معادله در واقع تغییرات ΔG° را در حساب دما می دهد

$$\Delta H_T^\circ = \Delta H_{T_0}^\circ + \left[\sum_P (n C_{p, mean}) - \sum_R (n C_{p, mean}) \right] (T - T_0)$$

معمولاً در حده داخلی کوره هم درجه اند و اینها مشکل کم است و حاصل می‌باشد $T_1 - T_2$ هم کم باشد
 که در این صورت این دو مجموعاً در مقابل ΔH_T قابل صرف نظر است
 در صورتی که بخوانیم ΔH_T در مقدار ثابتی ثابت فرض شود :

$$\Delta H_T = \Delta H^\circ = cte$$

باید ΔH_{T_2} ، ΔH_{T_1} را نسبت کرده پس یک مقدار متوسط برای ΔH° نسبت می‌آوریم.

$$\frac{dh_{ke}}{dT} = \frac{\Delta H^\circ}{RT^2} \Rightarrow h_{ke2} = \frac{\Delta H^\circ}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) \quad (8)$$

در این جا می‌تواند دو نوع متوسط تعریف کرد یکی متوسط ΔH° دارد و دیگری ΔH° در متوسط دارد

حال این سؤال مطرح می‌شود که تعریف برای ΔH° در تمام می‌آوریم ؟ (سؤال دوم)
 تعریف نیست :

$$N_i^e = N_i^o + \nu_i \varepsilon$$

تغییر در تعداد مول‌ها هم داریم $n_i = n_i^o + \nu_i \varepsilon$
 سرعت تشکیل سازنده نام = تعداد مولهای تشکیل شده از سازنده نام
 زمان t

$$\frac{\Delta N_i}{\Delta t} = \text{سرعت متوسط در مدت زمان } \Delta t \text{ تشکیل شده}$$

سرعت تک‌الشیخ مانند سرعت تک‌مول است که بطور محلی نسبت می‌تواند کمتر شود یا بیشتر باشد

$$\Rightarrow \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta N_i}{\Delta t} = \frac{dN_i}{dt}$$

$\frac{dN_i}{dt}$ یک خاصیت ترمودینامیکی نیست و extensive است و اگر بخواهیم intensive شود
 باید بر یک حجم کل یا تمام کل یا سطح کلی تقسیم شود

$$\Rightarrow \text{تعداد مولهای تشکیل شده از سازنده نام} = \text{سرعت تشکیل سازنده نام} \times \text{حجم یا سطح}$$

$$R_{ii} = \frac{1}{V_R} \frac{dN_i}{dt} \quad \text{حجم بالن} = V_R$$

در این جا از تعریف اول استفاده کردیم و بر حجم الکترولیت هم گرام ولی لزوماً حجم مواد داخل الکترولیت با حجم الکترولیت نیست در تعریف دوم داریم:

$$v_{\pm} = \text{حجم میان داخل الکترولیت} \quad \Rightarrow \quad R_{i2} = \frac{1}{v_{\pm}} \frac{dn_i}{dt}$$

(البته اگر باشد $v_g = v_r$)
تعریف سوم: اگر حجم ما در دست باشیم و حجم را هم هم جابجا قرار بگیریم:

$$v_s = v_{\text{میان}} \quad \Rightarrow \quad R_{i3} = \frac{1}{v_s} \frac{dn_i}{dt}$$

تعریف چهارم: اگر برای تقسیم از سطح میان دو فاز استفاده شود:

$$R_{i4} = \frac{1}{\delta} \frac{dn_i}{dt}$$

تعریف پنجم: اگر در دست ما الکتریسیته هم ما در دست باشیم بر حجم هم جابجا تقسیم می کنیم:

$$R_{i5} = \frac{1}{M_s} \frac{dn_i}{dt}$$

و در نهایت اگر از این ۵ تعریف درست می کند رابطه‌ای حاصل می شود که در نظریه تعریف:

$$\frac{dn_i}{dt} = v_r R_{i1} = v_{\pm} R_{i2} = v_s R_{i3} = \delta R_{i4} = M_s R_{i5}$$

سری اول فصل اول لاون اشکات: ۱-۱، ۱-۲، ۱-۳ (مجله ۹ و ۱۰ لایم است ارت - خوانده شود)
(۲۰۰۲ - ۱۹۹۹) (۳۰ فصل)

فصل دوم - بررسی تئوری معادله سرعت واکنش:

تقریباً با تئوریها بر دو نوع است: مدل آنتی‌کلس و غیره مدل برانداک و کلس. در بحث الکترولیت هم این است در این صورت هر دو مدل هم کار می کنند در این صورت با بر اساس حجم (حجم میان = حجم الکترولیت) تعریف می کنیم:

$$\phi = 1 \quad \rightarrow \quad R_i = \frac{1}{v} \frac{dn_i}{dt}$$

$$v_r = v_{\pm} = v$$

شدت جریان الکترولیت A در هر لحظه در واحد حجم

$$\Rightarrow R_A = \frac{1}{v} \frac{dN_A}{dt}$$

R_i یا R_A تابع حالت یا حالت متغیر (intensive) است.

حال اگر حالت ای تو کم شود N_A بر حسب حال برای مقدار $R_A >$ (تست) $R_A <$ حالت کم

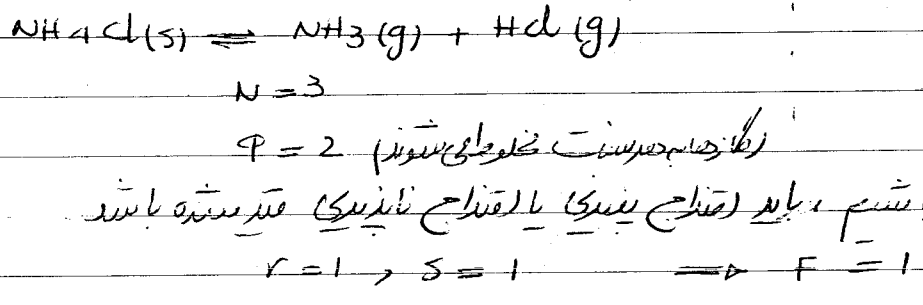
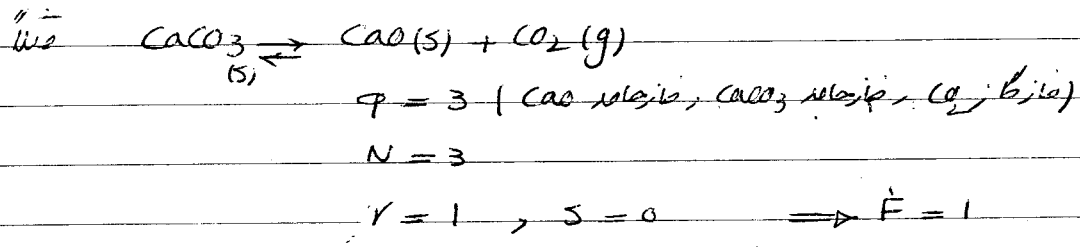
معادله ری فونسیسم : $RA = \frac{-1}{V} \frac{dNA}{dt}$

نقطه! اگر واکنش ریو کار باشد باقیستیم
 درجه آزادی چند است؟

سازش حالت قانون فازها لیسین / ی
 $F = N + 2 - \varphi$

حال اگر واکنش شیمیایی هم باشد باقیستیم این قانون چه تغییری خواهد کرد؟
 متغیرهای فازی تعدادی نمی کشند بی آنکه تعداد روابط یکی اضافه می شود بدین شرط لازم و کافی تعادل شیمیایی $\sum \nu_i \mu_i = 0$ که r مورد تابع متغیرهای فازی است.
 و باید این متغیر را در نظر بگیریم که چند واکنش مستقل داریم چون فعلیت یک واکنش از مجموع واکنش یا ضریب یک واکنش و دیگر ضریب آنرا مستقل نخواهد بود.

تعداد واکنش های مستقل r
 $F = N + 2 - \varphi - r - s$
 5: شرایط خاص



قانون فازها دوم: اگر فشار معینی از N سازنده حالت را بر روی هم بیاوریم و ... (بقدر)

این قانون در حضور واکنش شیمیایی هیچ تغییری نمی کشد
 چون متغیرهای فازی چند کمبودی می باشد حال تعدادی که به روابط اضافه می شود به همان
 تعداد هم کم می شود. یک رابطه برای $\sum \nu_i \mu_i = 0$ اضافه می شود و یک محصول
 و نوع دیگری آنرا.

در سیستم‌های تک فاز کانه واکنش شیمیایی در برابر انجام می‌شود و در هر زمانی در هر تعداد سازنده‌ها است

$$F = N + 2 - 1 - 1 \Rightarrow F = N$$

\$r=1\$ \$N=1\$ \$P=1\$

تغییرهای ماری: $N+1 \rightarrow N, N-1, N-2, \dots, 1, 0, -1, -2, \dots$

تغییرهای ماری: $N+1$ باقی مانده N تا پیش مستقل است و یکی وابسته است

این تغییر وابسته که در این حالت می‌شود مستقل است و یکی وابسته است که مستقل است

ملمه می‌شود

در این فصل بین سه ماده تبدیل شده A در نقطه R و با RA - مثال مشخص:

$$-RA = \frac{1}{V} \left(\frac{dNA}{dt} \right) \quad A \rightarrow R$$

RA یک خاصیت intensive (مستقل از مقدار) است. $RA = f(T, \text{غلظت})$

کسر ماری خاصیت ماری از غلظت هستند و اگر در حجم باشد یکی هستند و در حالت کلی ماری کسر ماری خاصیت از غلظت است که می‌کنیم. (در انجام واکنش‌ها از نسبت‌های ماری استفاده می‌شود و غلظت هم معمولاً ماری است)

تابع RA - بصورت تجربی می‌توان به شکل زیر ساده کرد:

$$RA = f_1(T) \times f_2(\text{غلظت})$$

تابع دوم در اصطلاح ثابت سرعت واکنش می‌نامند: $-RA = k f_2(\text{غلظت})$

مثلاً اگر داشتیم $RA = k_1 CA$ یعنی تابع RA و غلظت ساده شده و در واقع

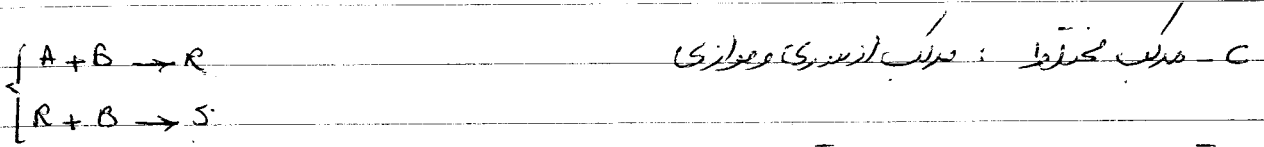
تابع کلی در رابطه k_1 و k_2 یا ثابت سرعت می‌گویند و ماری‌ها یا رابطه‌های معادله سرعت می‌نامند پس فقط در مثال قبلی k یا ثابت سرعت می‌نامیم.

واکنش‌ها به دو نوع $single R$ و $multiple R$ دسته‌بندی می‌شوند:

- 1- واکنش‌های $single R$:
 - a - واکنش سبک سبکی (زنجیری): $A \rightarrow R \rightarrow S$
 - b - واکنش سبک معاری: $A \rightarrow R$ و $A \rightarrow S$
 - c - واکنش‌های $multiple R$:
 - 1 - واکنش سبک: $A \rightarrow R$
 - 2 - واکنش سبک: $A \rightarrow R$ و $B \rightarrow S$

(side by side) واکنش‌های موازی فزاینده و واکنش‌های موازی رقابتی

در واکشش مولاری رقابتی دو ماده R و S در تولید شدن با هم در رقابتند



نسبت به A و R و سردی و نسبت به B و R و S مولاری رقابتی است.
در طراحی واکنش:

مدیک محصول را طرقتها یا صنعت مشخص می کند و مدیک مواد اولیه را طرقتها مشخص می کند همراه تنظیم شرایط عملیاتی و فصل از این اتوال واکنش صورت می گیرد و در این انتخاب نسبت نقش اصلی را دارد.

شرایط عملیاتی هم باید در مدیک بهینه تنظیم شود تا در کمترین اندازه بیشترین محصول برآورد شود.

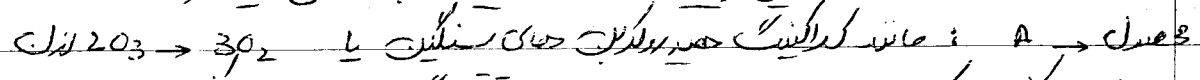
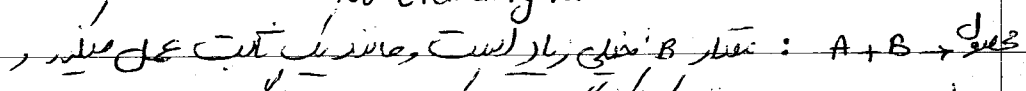
این مجموع عملیات در مورد هر دو نوع واکنش عنصری و مرکب وجود دارد ضمناً در مورد واکنشهای مرکب مسئله ای هم وجود دارد که حتی اندازه را تحت الشعاع قرار میدهد:

نوعی است که در واکنش های مولاری یک محصول، محصول مطلوب و مورد نیاز است مثلاً در واکنش های مرکب سردی محصول وسطی مطلوب است. پس باید سعی کرد تا محصول مطلوب بیشتر و محصول نامطلوب کمتر تولید شود که فاکتور توزیع محصول نامیده می شود. و اما در واکنش های عنصری:

۱- واکنش عنصری ابتدایی: از نظر مدیک یعنی تولید محصول مستقیم انجام می شود
Elementary R.

انواع واکنشهای عنصری

۲- واکنش عنصری غیر ابتدایی:
No Elementary R.



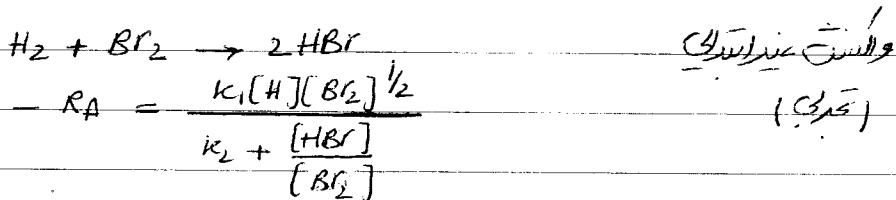
فرض میکنیم هر دو در این جهت $A \rightarrow B$ یا $A \rightarrow C$ مستقیماً با هم بر خورد کنند و محصول تبدیل میشوند که در این جهت می گوئیم واکنش عنصری ابتدایی است که خواصم داشت:

تعداد بر خورد ها مساوی است با غلظت و سرعت هم مساوی است با غلظت:

$$-RA = KCACB \quad \text{or} \quad -RA = KCA$$

در واکنش غیر ابتدایی A و B با هم برخورد می کنند و یکی تولید محصول می کند که نسبتاً به مقدار وسطی

تبدیل می شوند و مدار واسطه به محل تبدیل می شوند و در اکثر مواقع مدار واسطه قابل ردگیری نیستند و آنها را نمی بینیم.
تعمیر شود که چند نوع استیکی و غیر استیکی میزودانش های متغیر هستند.



فردان والنش استیکی و غیر استیکی از نظر ریاضی :



$$-R_A = k C_A^\alpha C_B^\beta$$

$$\frac{\alpha}{a} = \frac{\beta}{b}$$

اگر نسبت ضرایب برابری باشد :
و این تقریبی غلط برای همه ماده و ضرایب استوکیومتری حال
عاده ارتباط تناسب مانند استیکی وجود داشته باشد :

در این حالت والنش از نوع استیکی می شود که این تعریف ریاضی، تعریف فیزیکی بر مبنای مقادیر را می رساند.

$$\frac{\alpha}{a} + \frac{\beta}{b} \quad \text{والنش غیر استیکی} \quad \text{و اگر}$$

والنش نسبت به A از درجه α و نسبت به B از درجه β است و $n = \alpha + \beta$ درجه کلی والنش می باشد.

این درجه والنش فقط برای والنش های استیکی تعریف شده ؟
خیر، درجه والنش برای همه والنشی که بتوان نسبت آنها را نوشت $R_A = k C_A C_B$ نوشت
تعریف شده هم استیکی و هم غیر استیکی مثلاً در واکنش $H_2 + Br_2 \rightarrow 2HBr$ در این ظاهر که
غلظت HBr با ضرایب برابر است :

$$-R_A = \frac{k_1[H][Br_2]^{1/2}}{k_2 + \frac{[HBr]}{[Br_2]}} = k_3[H][Br_2]^{1/2}$$

درجه والنش می تواند صفر ریاضی هم باشد.

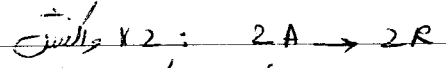
مؤلفه ریاضی : این اصطلاح برای همه نوع والنش استیکی و غیر استیکی تعریف شده و عبارت است از

تعداد مولکولهای که در واکنش شرکت می کنند مثلاً در تولید $2NH_3$ از $N_2 + 3H_2$ که مولکول اولیه برابر 2 است و در واکنش

بقیه به ترتیب مولکول اولیه و در مورد مستقیم در واکنش های ابتدایی و تولید محصول نتیجه می گیریم:
 مولکول اولیه واکنش های ابتدایی یا 1 است یا به عنوان محصول درجه اول در واکنش اولیه است.
 پس واکنش تولید NH_3 قطعاً غیر ابتدایی است.

واکنش $A \rightarrow R$ را در نظر بگیرید که ابتدایی درجه اول باشد پس:

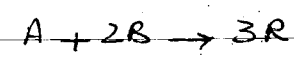
$$-R_A = k C_A$$



حال نسبت واکنش چیست؟ حال k_A می باشد چون در صورت مستقیم ذکر شده که ابتدایی درجه اول است.

در کل در هر واکنش ابتدایی یا غیر ابتدایی چنانچه نسبت آن معلوم باشد با ضرب یا تقسیم واکنش در یک عدد، نسبت واکنش عوض نمی شود (نسبت تابع صحت نوع واکنش است).

قرار داد: از این به بعد چنانچه گفته شود واکنش $A \rightarrow R$ را در نظر بگیرید که ابتدایی است و از آنجا که درجه اول داریم بگوییم آن معلوم است پس میگوییم واکنش ابتدایی بود و واکنش را آن حاصل می شود پس که مولکول اولیه است مستقیم باشد پس اگر درجه اول باشد شکل $A \rightarrow R$ و اگر درجه دوم باشد شکل $2A \rightarrow 2R$ (در صورتی که هر دو در واکنش هستند)



$$-R_A = k_A C_A C_B^2$$

$$-R_B = k_B C_A C_B^2$$

$$R_R = k_R C_A C_B^2$$

داریم:
 نرخ واکنش بر حسب A :
 B " "

از آنجا که ضرایب استوکیومتری مساوی نسبت پس k_A باید با هم متناسب باشد یا نسبت R_A با هم برابر باشند پس در واکنش های ابتدایی علاوه بر شکل بیان مولکول اولیه، k هم با هم معلوم باشد که بر حسب کدام ماده نوشته شده اند.

$$\frac{-R_A}{1} = \frac{-R_B}{2} = \frac{R_R}{3}$$

سپس داریم نسبت نوشته شود که بر حسب کدام ماده است
 $A + B \rightarrow R$: $\frac{-R_A}{1} = \frac{-R_B}{1}$

$$\frac{dn_A}{-1} = \frac{dn_B}{-2} = \frac{dn_R}{+3} = \frac{dn_i}{\nu_i} = dt$$

$$R_i = \frac{1}{V} \frac{dn_i}{dt} \xrightarrow{*} \frac{r_i}{v_i} = \frac{r_j}{v_j} = \frac{1}{V} \frac{d\varepsilon}{dt} \longrightarrow \frac{-R_A}{1} = \frac{-R_B}{2} = \frac{-R_R}{3}$$

این روابط یکی هستند زیرا علامتهای منفی و نسبت در صورت قرار گرفته اند و اساساً ظرف را هم نشان میدهند.

$$\Rightarrow \frac{k_A}{1} = \frac{k_B}{2} = \frac{k_R}{3}$$

نتیجه ۴
بررسی سؤال: (درالشت های ابتدایی)

۱- تعیین مولکولها را بنویسید.

۲- معادلات استوکیومتری مسائل باشد، طوری که ثابت سرعت بر اساس آن نوشته شده باشد. معادله معادله شود و همین ثابتی که سرعت برای مواد تشکیل دهنده را اگر معادلات استوکیومتری برابر باشد از نظر ظرفیت.

$$-R_A = k C_A^n$$

رابطه:

کار برای خود درست.

$$-R_A = \frac{-1}{V} \frac{dn_A}{dt} \xrightarrow{v=ct} -R_A = -\frac{dCA}{dt}$$

$$\Rightarrow \frac{\text{غلظت}^n}{\text{زمان}} k (\text{غلظت})^n \Rightarrow k (\text{غلظت})^{n-1} \text{ زمان}$$

سین برای والشت در جدول بعد کار بر این است با $(n=1)$ زمان

مسئله ۲ (۲.۶ قدم)

یک والشت معین سرعتی شکل در جدول: $-R_A = 0.005 C_A^2$ با واحد $\frac{\text{mole}}{\text{cm}^3 \cdot \text{min}}$
 اگر غلظت بر حسب $\frac{\text{mol}}{\text{lit}}$ بیان شود و زمان بر حسب hr معادله سرعت را بنویسید:
 $\Rightarrow -R_A [=] \frac{\text{mole}}{\text{lit} \cdot \text{hr}}$ حاصل k است، بنابراین

$$k = 0.005 \frac{\text{cm}^3}{\text{mole}} \times \frac{1}{\text{min}} \left(\frac{1}{\text{lit} \times 10^3} \right)^{1-2} = (\text{غلظت})^{-2} \times \frac{1}{\text{lit}}$$

$$k = 0.005 \frac{\text{cm}^3}{\text{mole}} \times \frac{1}{\text{min}} \times \frac{1 \text{ lit}}{1000 \text{ cm}^3} \times \frac{60 \text{ min}}{1 \text{ hr}} = 30 \times 10^{-5} = 3 \times 10^{-4} \frac{\text{lit}}{\text{mole} \cdot \text{hr}}$$

$$\Rightarrow -R_A = 3 \times 10^{-4} C_A^2, \quad \frac{\text{mole}}{\text{lit} \cdot \text{hr}} \quad (۱)$$

ریتل دفع اندر : $C_A = 1 \frac{\text{mole}}{\text{lit}}$

(1) $\rightarrow -R_A = 3 \times 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{lit} \cdot \text{hr}}$

$\rightarrow 10^{-3} \frac{\text{mol}}{\text{cm}^3}$

(2) $\rightarrow -R_A = 0.005 \times (10^{-3})^2 \frac{\text{mole}}{\text{cm}^3 \cdot \text{min}} \times \frac{10^3 \text{cm}^3}{1 \text{lit}} \times \frac{60 \text{min}}{1 \text{hr}} = 3 \times 10^{-4} \frac{\text{mole}}{\text{lit} \cdot \text{hr}}$

کدر واقع هم این دو نرخ یکسان است پس

دو نوع مسئله داریم

۱- تغییر واحد

۲- تغییر در سرعت یا در حجم مسئله

مسئله ۲-۷ (۲.۵ رقم) :

برای یک واکنش فاز گازی در 400K (در حالت معمولاً شرایط فرض می شود) سرعت برابر

$\frac{-dP_A}{dt} = 3.66 P_A^2, \text{ atm/hr}$

واحدهای سرعت را درست کنید

$\frac{\text{atm}}{\text{hr}} [=] k (\text{atm})^2 \Rightarrow k [=] \frac{1}{\text{atm} \cdot \text{hr}}$

حل در خواصم واکنش را بر حسب غلظت بنویسیم :

$-R_A = -\frac{1}{V} \frac{dN_A}{dt} = k C_A^2, \text{ mole}$

$PV = nRT \Rightarrow P = CRT \Rightarrow P_A = C_A RT$

$P_A = C_A RT \Rightarrow -RT \frac{dC_A}{dt} = 3.66 C_A^2 (RT)^2$

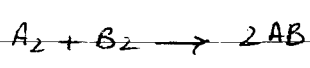
$\Rightarrow -\frac{dC_A}{dt} = 3.66 (RT) C_A^2$

واحد R (ثابت عمومی گاز) برابر است با واحد 3.66 تنظیم شود :

$R = 82.05 \frac{\text{cm}^3 \cdot \text{atm}}{\text{mole} \cdot \text{K}} \times \frac{1 \text{lit}}{1000 \text{cm}^3} = 0.08205 \frac{\text{lit} \cdot \text{atm}}{\text{mole} \cdot \text{K}}$

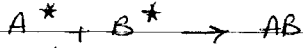
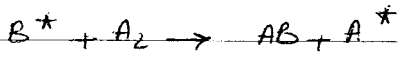
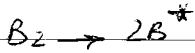
$\Rightarrow -\frac{dC_A}{dt} = 3.66 \left(\frac{1}{\text{atm} \cdot \text{hr}} \right) \times 0.08205 \left(\frac{\text{lit} \cdot \text{atm}}{\text{mole} \cdot \text{K}} \right) \times 400 (\text{K}) \times C_A^2 \left(\frac{\text{mol}^2}{\text{lit}} \right)$

$\Rightarrow -\frac{dC_A}{dt} = 120.12 C_A^2 \frac{\text{mole}}{\text{lit} \cdot \text{hr}}$



تغییرات مثال در واکنش معده اندر است :

که چون غیر آندی است باید واسطه‌های وجود داشته باشد :



در عمل یک واکنش غیر آندی را مجموعی از واکنش‌های آندی می‌دانیم. مواد واسطه (از آنجا که سریعاً بوجود می‌آید و سریعاً هم از بین می‌رود قابل شناسایی نیستند).

- انواع مواد واسطه‌ای :

۱- ریشه‌های یا رادیکال‌های آزاد :

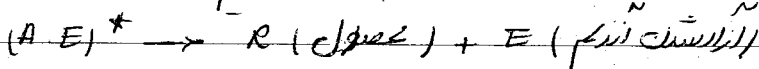
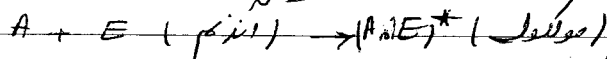
مولکول‌ها یا ایزای مولکول‌های هستند که دارای الکترون‌های غیر جفت هستند که این مواد به نوبت در مواد نامحالی محلول هستند. واکنش‌های خاص طاری اثر از این نوعند

۲- یون‌ها :

یک سری از مواد به یون‌ها تجزیم می‌شوند (معمولاً در حلال).

۳- مولکول‌ها :

بعضی مواقع مواد واسطه‌ها در مولکول‌ها هستند مثلاً در واکنش‌های یونی



۴- کمپلکس‌های گذرا :

دو نوع کمپلکس داریم : گذرا و فعال

این مواد واسطه‌ها به دو نوع مختلف تقسیم می‌شوند :

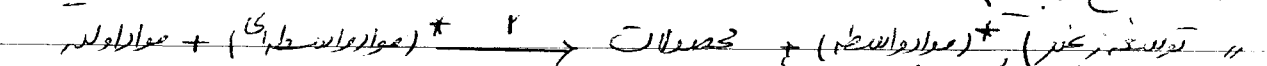
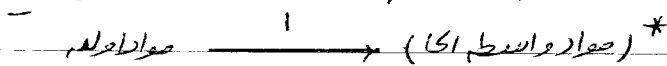
۱- از طریق کمپلکس‌های زنجیری

۲- غیر زنجیری

در واقع این دو نوع کمپلکس خود انجام واکنش‌های غیر آندی است.

- مکانیسم زنجیری :

در کل :

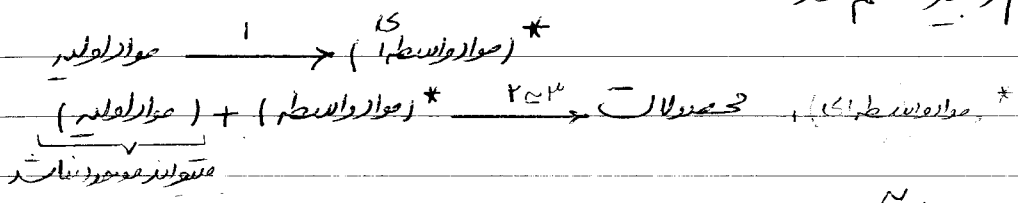


می‌تواند خود را هم بسازد

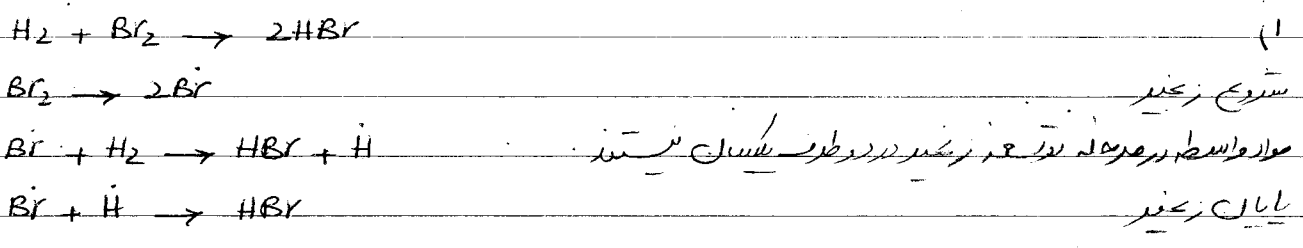
مواد واسطه‌ای مرحله قبل یا جدید

در همه تحلیلهای تئوریتیکهای ریختاری در غیر زنجیری از هر حد در هم است
 یا همان زنجیر (محصولات) $\xrightarrow{2}$ (مواد واسطه ای) *

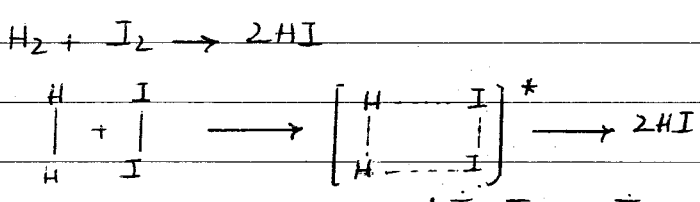
محصول اول و ۲ را می‌توانیم زنجیری هم قرار داد:



محصول مثال: (از نوع ریشه ای)



۴) از نوع تکسین گند



بین H و I پیوندی میان بنیادی ایجاد می‌شود که باعث بستن شبکه پیوندهای H-H, I-I می‌شود

این با بدلیت تشکیل نوع خاصیم بسیار تجربه است که بصورت مقایسه ای

۳) از نوع مولکولی مانند تئوریتیکهای پوریتیک (صفت اول)

روش کار:

برای حصول تئوریتیک غیر ابتدایی یک خاصیم مدون می‌کنیم و بر اساس این فرض یک مواد معدنی
 می‌سازیم که این مواد با تجربه هم سازگار بود پس این خاصیم به احتمال قوی درست
 خواهد بود (تالیلهای هر حد هم کافی نیست) بلکه باید واسطه‌ها را بسازیم ولی این روش جز
 کاربرد چندین سطح نیست بلکه حافظه به معادله ریاضی صورت می‌گیرد

مشق

دو قانون مهم سین به معادله سینتیک واکنش :

1. قانون اول :

سرعت مجموع مساوی است با مجموع سرعتها

$$R_{net} = R_{overall} = \sum R_i$$

2. قانون دوم :

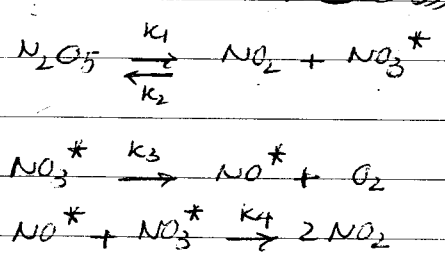
در صورتی که سرعت مواد واسطه در طول واکنش به سرعتی که در آن وجود دارد تغییر نکند و در آن زمان از نظر ریاضی یعنی تغییرات غلظت مواد واسطه نسبت به زمان صفر است.

$$\frac{d[X^*]}{dt} = 0 \Rightarrow R_{X^*} = 0$$

این قانون، قانون سرعت کنوانسیون تغییر یافته است (steady state approximation) یا قانون تغییر حالت کنوانسیون (stationary s. Approximation) است.
 1. P.S.S.H. قانون فرض حالت شبه کنوانسیون (Pseudo Steady State Hypothesis)

سند 18-2 (6-2 مقیم) :

بر واکنش تجزیه N_2O_5 در یک سیستم زنجیره ای پیشنهاد کرده است :



مشکل در این طرح با تجربه سازگار است و می تواند تجزیه N_2O_5 را توضیح دهد.
 پیشنهادی : $N_2O_5 \rightarrow 2NO_2 + \frac{1}{2}O_2$

1) $R_{N_2O_5} = k_1[N_2O_5] - k_2[NO_2][NO_3^*]$

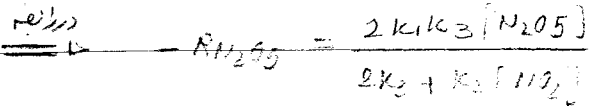
سینتیک تجربی :
 - $R_{N_2O_5}$
 در حالتی که NO_2 زیاد شود \ominus
 در حالتی که NO_3^* زیاد شود \oplus

2) $R_{NO_3^*} = k_1[N_2O_5] - k_2[NO_2][NO_3^*] - k_3[NO_3^*] - k_4[NO^*][NO_3^*] = 0$

2) $R_{NO^*} = k_3[NO_3^*] - k_4[NO^*][NO_3^*] = 0 \Rightarrow [NO^*] = \frac{k_3}{k_4}$

2) $R_{NO_2} = k_1[N_2O_5] - k_2[NO_2][NO_3^*] - k_3[NO_3^*] - k_4 \frac{k_3}{k_4} [NO_2] = 0$

$[NO_2] = \frac{k_1[N_2O_5]}{k_2 + k_3}$



در حالت تعادل، سرعت تولید نیتروژن دی‌اکسید برابر با سرعت مصرف آن است.

با توجه به سازگاری است
 برای مقدار $k_2 = 5$ است که می‌توان فرض کرد $k_2 \gg 2k_3$ که در حجم - حواص - فوق حدیسم
 برای آن است $k_2 \gg 2k_3$ و در نهایت k_2 را نادیده می‌گیریم

- سری دوم فصل دوم نون (سخت) : 1 - 2 - 3 - 10 (7 قلم) - 20 (8 قلم) - 21 (9 قلم)
 4 - (12 قلم) - 9 (13 قلم) - 14 - 15 (14 قلم) - 16 (15 قلم)

تعداد سرعت تابع دمای است: در حالت تعادل که تاکنون با هم صحبت کردیم، در حالت تعادل

$R_A = k f(T)$
 $k = g(T)$

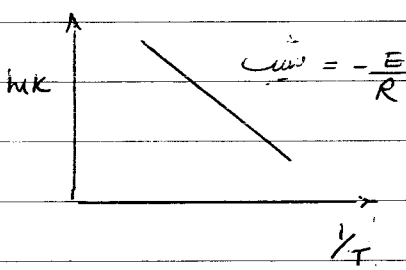
این تئوری تجربی توسط آرنیوس ارائه شده است
 E : انرژی آکتیواسیون (مخالف سازی)

$k = k_0 e^{-E/RT}$

تئوری آرنیوس

k_0 : تابع دما نیست و ثابت است (مقدار برخورد) \rightarrow ضرایب برخورد

علاوه بر k_0 ثابت است و در دماها مختلف سرعت و ثابت سرعت با هم تغییر می‌کند
 برای k و آنتالپی h که h بر حسب $\frac{1}{T}$ رسم شود آنگاه درستی آن را می‌توان مشاهده کرد



این نمودار توسط تجربی ثابت شده است:

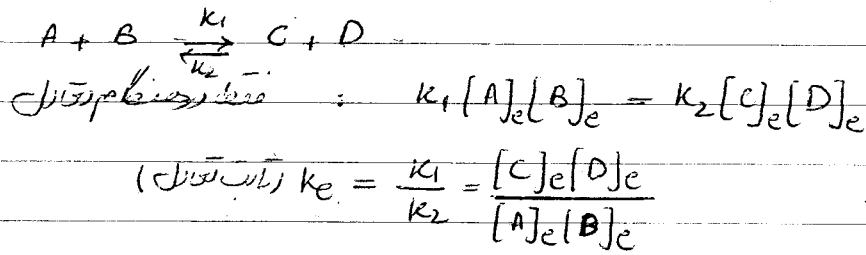
$\frac{d \ln k}{d(1/T)} = -E/R$

$k = k_0 e^{-E/RT}$

تئوری آرنیوس برای آنتالپی همراه است است \rightarrow h بر حسب $\frac{1}{T}$ رسم شود
 (که تابع دما نیست) که انرژی آکتیواسیون منجر باشد که یعنی k تابع دما نیست که غیر
 فصل است

تئوری آرنیوس

قانون آرنیوس: $\frac{d \ln k_0}{dT} = \frac{\Delta H^\circ}{RT^2}$



* k های تابع دما هستند و می توانند از راه تجربی یا از راه تئوری (مکانیک کوانتوم) بدست آیند.
 * در دماهای بالا، تقریباً تمام مولکولها انرژی کافی برای عبور از سد انرژی فعال را دارند و در نتیجه k ها به سرعت افزایش می یابند.
 * در دماهای پایین، فقط آن مولکولها که انرژی کافی برای عبور از سد انرژی فعال را دارند، واکنش می دهند.

$$\frac{d \ln k_1/k_2}{dT} = \frac{\Delta H^\circ}{RT^2} = \frac{E_1 - E_2}{RT^2}$$

$$\frac{d \ln k_1}{dT} = \frac{E_1}{RT^2} \Rightarrow k_1 = k_{10} e^{-E_1/RT}$$

$$\frac{d \ln k_2}{dT} = \frac{E_2}{RT^2} \Rightarrow k_2 = k_{20} e^{-E_2/RT}$$

تفاوت انرژی فعال (سد انرژی) در واکنشها (مکانیک کوانتوم) در دماهای بالا

تئوری آرنیوس
 دمای بالا

$$k = k_0 e^{-E/RT}$$

در دماهای بالا، E داریم. پس برای بدست آوردن این دو مجهول باید در دماهای مختلف ثابت سرعت را داشته باشیم که این را تجربه می کنیم. با این استاندارد داده های تجربی ممکن است آ 10000 درصد خطا وجود داشته باشد.

$$\frac{k_1}{k_2} = ? \Rightarrow E = \frac{RT^2}{k} \frac{dk}{dT}$$

تئوری آرنیوس این ایده حکیم است که مولکولها با هم برخورد می کنند و بر اثر برخورد مولکولها واکنش انجام می شود.

بافت پیوندهای اشتراکی که ماهیت پیوندهای اشتراکی هستند این پیوندها دارای ماهیت یونی هستند. یعنی از آن جهت که آنجایی که از ماصله نسبت می کنند در جهت حفظ انرژی و در جهت حفظ ماهیت هستند و هم می بینیم وجود تفاوت اتصال که ما داریم و ما می بینیم که در جهت یونی است.

سین مولکولها را با هم در حرکتند تا هم تصادف می کنند ولی این تصادف به معنی تماس جاذبه نیست چون در حد کمتر از قطر تصادف جاذبه به دافعه تبدیل می شود (تأخیر دافعه به طول بیشتر از جاذبه است) و در نهایت این بر خورد ها منجر به واکنش می شود
 برای محاسبه سرعت ابتدا باید تعداد برخوردها در واحد حجم را بدست آوریم:

$$A + A \rightarrow A_2 \quad | \quad A + B \rightarrow AB$$

$$Z_{AA} = A \cdot A \cdot A \text{ (تعداد برخوردها در واحد حجم)} = \sigma_A^2 \times n_A^2 \times \sqrt{\frac{4\pi KT}{M_A}}$$

در هر سانتی متر در هر ثانیه cm^3

σ_A : (پهنای دایره ای تصادف برخوردها در واحد حجم cm)

n_A : (تعداد مولکولها در هر cm^3)

$\sqrt{\frac{4\pi KT}{M_A}}$: سرعت با نسبت

M_A : جرم مولکولی

تعداد مولکولها = اتمها در گرم = $(N) = 6.023 \times 10^{23}$ عدد آووگادرو

K : ثابت بولتزمن = $\frac{R}{N} = 1.3 \times 10^{-16} \text{ erg/K}$ $\rightarrow \text{dine} \times \text{cm}$

T : (دما) مطلق بر حسب K

با فرض اینکه $n_A = n_B$:

$$C_A [=] \text{ mole/lit} \Rightarrow C_A \times N = \text{تعداد مولکولها در هر لیتر} \Rightarrow n_A = \frac{C_A \times N}{1000}$$

$A + B \rightarrow AB$:

$$Z_{AB} = \left(\frac{\sigma_A + \sigma_B}{2} \right)^2 \times n_A \times n_B \times \sqrt{8\pi KT \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)}$$

$$Z_{AB} = \left(\frac{\sigma_A + \sigma_B}{2} \right)^2 \times \frac{N^2}{10^6} C_A C_B \sqrt{8\pi KT \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)}$$

$$R_i = \frac{1}{V} \frac{dn_A}{dt} \Rightarrow R_{AB} [=] \text{ mol/lit} \cdot \text{sec} \Rightarrow R_{AB}^i = \frac{Z_{AB}}{N} \times 1000$$

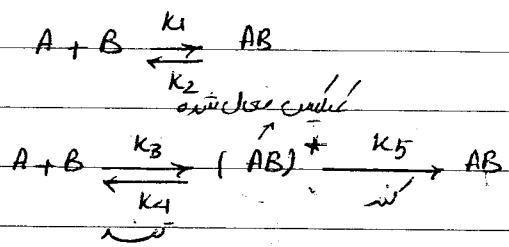
$$\Rightarrow R_{AB}^i = \left(\frac{\sigma_A + \sigma_B}{2} \right)^2 \times \frac{N}{10^3} \sqrt{8\pi KT \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)} C_A C_B$$

سرعت تفریک بسیار بسیار از R_{AB} (سرعت واقعی) بزرگتر است
 سین نتیجه می گیریم این تفریک که مولکولها در هر ثانیه منجر به واکنش می شود بسیار است
 بلکه تعداد این تفریک از برخوردها منجر به واکنش می شود

$e^{-E/RT}$
 طوق تئوری توزیع انرژی ماکسول :
 E : حداقل انرژی است که مولکول باید داشته باشد تا برخوردشان منجر به واکنش بشود
 این تئوری محاسبه فیزیکی انرژی المکسول بر اساس اصل برابری انرژی و حرکت
 $E \gg RT \Rightarrow$ یعنی تعداد کمی از برخوردها منجر به واکنش میشود
 $\Rightarrow e^{-E/RT}$ کسر کوچکی است

$$R_{AB} = \left(\frac{r_A + r_B}{2} \right)^2 \times \frac{N}{10^3} \times \sqrt{8KT \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)} e^{-E/RT} C_A C_B$$
 مقادیر ثابت
 $\Rightarrow R_{AB} = k_0' \sqrt{T} e^{-E/RT} C_A C_B$
 ضرایب برای تئوری ساده
 این تئوری با فرض واکنش استاتی درست است

تئوری تصادم
 تئوری انتقال توان ستره



مورد تشکیل در تئوری تصادم است
 تئوری برخوردی یا تئوری انتقال شده عکس هم باطل هم هستند

$\Rightarrow R_{AB} = k_5 [(AB)^*]$, $k_5 = \frac{kT}{h}$
 $k = \frac{R}{N} = 1.3 \times 10^{16} \text{ Erg} / \text{K}$
 $h = 6.63 \times 10^{-27} \text{ Erg} \cdot \text{sec}$

ثابت تعادل واکنش معادل
 $K_c^* = \frac{k_3}{k_4} = \frac{[(AB)^*]}{[A][B]}$

وجود آن در تئوری تصادم
 $K_c^* = e^{-\Delta G^*/RT}$, $\Delta G^* = \Delta H^* - T\Delta S^*$

$R_{AB} = \frac{kT}{h} [A][B] e^{-\Delta G^*/RT}$

$\Rightarrow R_{AB} = \frac{kT}{h} e^{-\Delta H^*/RT} e^{-\Delta S^*/RT} [A][B]$

$\Rightarrow k = k_0' T e^{-E/RT}$

شیب جبرائیل :

$$k = k_0 T^m e^{-E/RT}$$

شیب اول درجه : $m = 0$

شیب نیم درجه : $m = 1/2$

شیب یک درجه (حالت ساده) : $m = 1$

شیب $m = 3/4$: $m = 3/4$ (حالت)

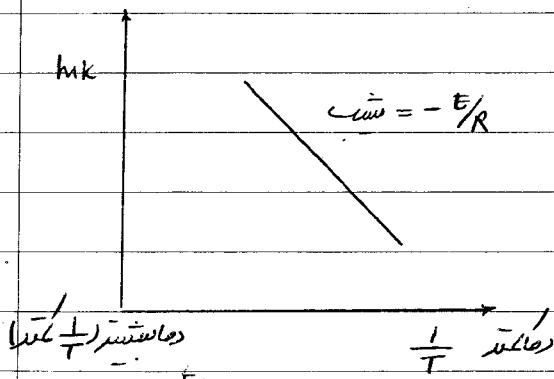
رابطه میان شیب و توانی (T) تاثیر پذیری پارامترهای مختلف عبارتند از $e^{-E/RT}$ (شیب) :

$$\ln k = \ln k_0 + m \ln T + \left(\frac{-E}{RT} \right)$$

$$\frac{d \ln k}{dT} = \frac{m}{T} + \frac{E}{RT^2} = \frac{mRT + E}{RT^2} \quad E \gg RT \rightarrow E \gg mRT$$

در حالتی که $E \gg RT$ و $E \gg mRT$ (معمولاً در دماهای بالا) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{E}{RT^2}$

شیب در این حالت برابر با E/RT^2 خواهد بود که حاصل شیب در حالتی که $E \gg RT$ است.



کاربردهای مختلف در شیب $\ln k$:
 شیب $\ln k$ این جدول تجربی در شیب
 از آنکه $k = k_0 e^{-E/RT}$ در شیب $\ln k$ برابر با $-E/R$ است

در شیب $\ln k$ برابر با $-E/R$ است و معادله $k = k_0 e^{-E/RT}$ را می توان از آن استخراج کرد.

$$\begin{cases} k_1 = k_0 e^{-E/RT_1} \\ k_2 = k_0 e^{-E/RT_2} \end{cases} \Rightarrow E = ? = k_0 = ? \quad E = ? = k_0 = ?$$

در واقع $k = ?$

نکته 1 :

هر چه E/R به خط قائم نزدیکتر باشد یعنی حساسیت نسبت به دما بیشتر است. (با وجود برقراری دما در آن دماهای مختلف نسبت به دما)
 حساسیت نسبت به دما در آن حساسیت دما را کم می کند که در آن حساسیت نسبت به دما
 نامطلوب است و باید کمتر شود.
 هر چه انرژی آنتروپی بیشتر باشد حساسیت نسبت به دما کمتر است و بالعکس.

1- نت 2 :

برای تک واکنش معین باید E معین ، عدال مساویت واکنش نسبت به دریا مساوی نسبت
کند در دریا های غیر عدال مساویت بیشتر نسبت تا دریا های بالاتر .
در منطقه دریا کمتر مثلاً 10 درم افزایش در مساحت برای 2 برابر شدن در منطقه دریا بیشتر مثلاً 90
درم افزایش در مساحت برای 2 برابر می کند چون با MA سنو طر لایم . کت مساویت (سوال
این مساویت) - E نسبتی دارد .

فصل سوم - بررسی تجربی معادله سرعت در طریق شمارا کتورهای (batch) :
برای بررسی تجربی معادله سرعت هم می توان از کتورهای batch استفاده کرد درم از کتورهای
جریانی . که برای تصدیق کردن بررسی از کتورهای جریانی استفاده می شود اما کتور از کتورهای
batch (در این فصل) استفاده می کنیم

روش های بررسی تجربی معادله سرعت :

روش اول - سرعت واکنش عملاً با تغییرات تعداد مول در وقت ، تغییرات غلظت (دریا ط غلظت
دارد پس روش اول عبارت است از روش محاسب تغییرات غلظت یک ماده اجم از مواد اول
یا محصولات است بهر حال که هم درین روش هم صیاسته .

روش دوم - واکنش - تبدیل مواد اول به محصولات - تغییر غلظت - تغییر خواص پس
این روش عبارت است از اندازه گیری تغییرات یک خاصیت فیزیکی نسبت به زمان مثل
در واکنش های پلیمریزاسیون که خاصیت ویسکوزیته لغوالت معیار غلظت مواد اصلی می شود
و یا مانند جذب هدایت حرارتی یا الکتریکی ، جذب ششست نور و هدایت حرارتی و ...

روش سوم

روش های بازگاری :

روش سوم - روش اندازه گیری تغییرات مشارک در حجم ثابت (با تغییرول داشته باشیم)

روش چهارم - روش اندازه گیری تغییرات حجم در فشار ثابت

که در این فصل از روش اول استفاده می کنیم

مثال رویش بسف - $aA + bB + \dots \longrightarrow rR + sS + \dots$
 گفته می شود نسبت استوکیومتری، r و s می شوند

نسبت تغییر تعداد مول : $\Delta n = (r + s + \dots) - (a + b + \dots) \neq 0$
 اگر $\Delta n = 0$ باشد تغییرات فشار، کل غلظت، کل جرم، کل انرژی، کل دما، کل تغییرات استوکیومتری (بارد)

نسبت حجم ثابت : $n_i = \frac{1}{V} \frac{dN_i}{dt}$

$v = cte \Rightarrow n_i = \frac{dc_i}{dt}$

در حجم حجم ثابت باشد، n_i با c_i رابطه دارد ولی نه برعکس

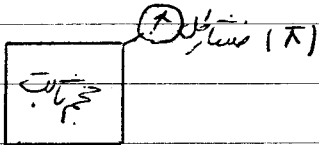
در فاز طریقی نه طازرها را می توان طازر طازر می بینیم :
 سه فشار، سه کل، سه تغییرات، سه تغییرات
 نسبت بر طازر سه تغییرات را می بینیم

$P_i = C_i RT$

$n_i = \frac{1}{RT} \frac{dP_i}{dt}$

$P_i = y_i \pi$ (فشار کل)

فشار کل در واقع حاصل فشاری است که در فشار سه تغییرات، سه تغییرات، سه تغییرات از سه مولکول است.



در لحظه $t=0$: $N_A, N_B, \dots, N_R, N_S, \dots, N_I$

تغییرات مولی در آنجا \rightarrow تغییرات مولی حاصل در لحظه t که تغییرات مولی A در لحظه t است و آنست (آنها).

$t=0$ در لحظه مولی در $= N = N_A + N_B + \dots + N_R + N_S + \dots + N_I$

در لحظه $t > 0$: $N_A = N_A - ax$ (در تغییرات مولی و آنست)

در این رابطه باطل رابطه : $dn_i = v_i dx$

$n_i - n_i^0 = v_i x \Rightarrow n_i = n_i^0 + v_i x$
 v_i تغییرات مولی
 v_i مولی در آنجا

$v_i = v_A = -a \Rightarrow N_A = N_A - ax$

$N_B = N_B - bx$

$N_R = N_R + rx$

$N_S = N_S + sx$

$N_I = cte$

$$N = N_0 + \alpha \Delta n \quad \Delta n \neq 0$$

مانندت آوردن یک سرعت مثلا r_A یعنی سرعتی که در دست می آید.

از آنجا که ثابت p یا C_A هستیم پس از رابطه زیر استفاده می کنیم:

$$N_A = N_{A_0} - \alpha x \quad \text{مشترک در x هستند است}$$

$$N_A = N_{A_0} - \alpha \times \frac{N - N_0}{\alpha} \quad (I)$$

$$\xrightarrow{\div V} \frac{N_A}{V} = \frac{N_{A_0}}{V} - \frac{\Delta n}{\Delta n} \times \left(\frac{N}{V} - \frac{N_0}{V} \right)$$

معنای حجم ثابت: حجم مخصوص یا دانسیته ثابت. چون حجم ثابت است با وجود انجام واکنش

به شرط حجم ثابت نیاز داریم که در هر لحظه یک N_A و یک V داریم:

$$\xrightarrow{*} C_A = C_{A_0} - \frac{\alpha}{\Delta n} (C - C_0) \quad \text{غلظت کل اولیه}$$

و یک $N_{A_0} = C_{A_0} V$ به شرط حجم ثابت نیاز داریم و این رابطه را به C_A خواهیم شد مگر $V = V_0$ باشد.

پس در کل رابطه $* \rightarrow$ حجم ثابت را احتیاج دارد که این شرط از اول کار لحاظ شد.

$$r_A = f(T, C_A) \quad \text{فصلیم}$$

در پاره اول ثابت: (intensive) (متغیر)

چون r_A فقط برای یک ظرف است پس این رابطه انتقال و غیر قابل خواهد بود است (P هم در T و C_A زنده است)

می توانیم رابطه I را بر V حجم تقسیم کرد:

$$\xrightarrow{\div V_0} \frac{N_{A_0}}{V_0} = C_{A_0} \quad \text{و} \quad \frac{N_A}{V} = C_A \quad \text{مقد}$$

$$\begin{aligned} L_A \quad PV &= NRT \\ \pi &= CRT \end{aligned}$$

$$\Rightarrow P_A = P_{A_0} - \frac{\alpha}{\Delta n} (\pi - \pi_0)$$

t	π	P_A	C_A

$$r_A = \frac{dC_A}{dt} = \frac{1}{RT} \frac{dP_A}{dt}$$

در حال این رابطه C_A با r_A رابطه دارد:

این سرعت (r_A) منجی است چون غلظت مولکول کم می شود

یا با درجه حرارت:

$$P_R = P_{R_0} + \frac{1}{\Delta n} (\pi - \pi_0) \Rightarrow r_R = \frac{dC_R}{dt} = \frac{1}{RT} \frac{dP_R}{dt}$$

بحث روشن اول - نسبت آوردن معادله سرعت از طریق روش اندازه گیری تغییرات غلظت

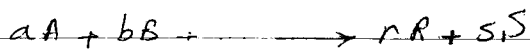
نسبت به زمان (در حالت حجم ثابت) یا روش غلظت نسبی:

که هر روشی می توان غلظت را اندازه گرفت مانند تغییرات

t	C_A

روش غلظت نسبی

درمان برای رسیدن به معادله سرعت از طریق جدول غلظت نسبی و روش وجود دارد:



$$v = cte \Rightarrow r_i = \frac{dc_i}{dt} = kf(c_i)$$

نسبت آوری r_i یعنی نسبت آوری $kf(c_i)$:

$$\frac{dc_i}{f(c_i)} = k dt$$

در حال $f(c_i)$ معلوم است:

قسم اول

محور تابعی برای $f(c_i)$

قسم دوم

منحنی c_i ها بر حسب یکی از آنها (آن یکی که جدول غلظت نسبی است) پلازم

که تمام اوسم را با $dc = \frac{dn_i}{v_i}$ مربوط

ی شود:

$$\frac{r_i}{v_i} = \frac{r_j}{v_j} = \dots$$

درصورتی که ثابت $\frac{dc_i}{v_i} = \frac{dc_j}{v_j}$

قسم سوم

انتگرالی

$$f(c_i) = g(c_i)$$

$$\frac{dc_a}{a} = \frac{dc_b}{b} = \dots = \frac{dc_r}{r}$$

سین درصورتی که تمام اوسم لازم:

$$\Rightarrow \frac{dc_i}{g(c_i)} = k dt$$

محور با اوسم محور اول که می توان استرال گفت:

$$\int_{c_0}^{c_i} \frac{dc_i}{g(c_i)} = \int_0^t k dt$$

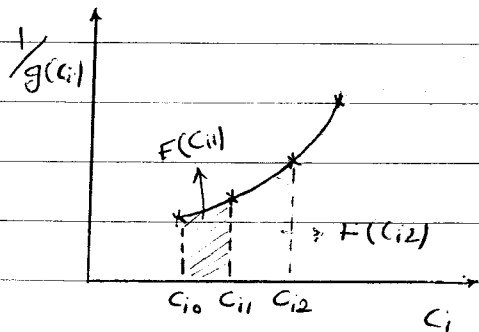
$$F(c_i) = \int_{c_0}^{c_i} \frac{dc_i}{g(c_i)} = kt \quad (*)$$

حال میخواهیم سهم محور اول را بدست آورده است

این مقدار $1/g(c_i)$ را در جدول c_i کسبیم

تابع $g(c_i)$ معلوم است ولی c_i تغییر میکند

که در این کار جدول استفاده میکنیم



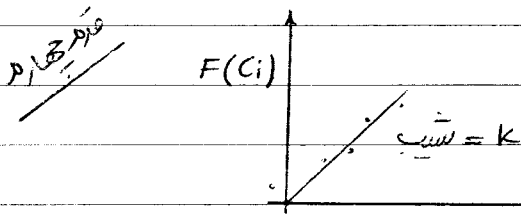
$F(c_i)$ عدد تابعی از c_i است و استرال

هم سطح بر محور عمودی می باشد

$$F(c_{i1}) = \int_{c_0}^{c_{i1}} \frac{dc_i}{g(c_i)}, \quad F(c_{i0}) = 0, \quad F(c_{i2}) = \int_{c_0}^{c_{i2}} \frac{dc_i}{g(c_i)}$$

t	C _i	1/g(C _i)	F(C _i)
0	C ₀		C ₀ = F(C ₀)
1	C ₁		
...	...		

و جدول صورت مقابل تکمیل می شود :



در این منحنی خط مستقیم می کشیم که از مبدأ می گذرد و شیب آن برابر با k است. در این منحنی می آید (طبق استدلال + باید خط مستقیم باشد).
 $F(C_i)$ بر حسب C_i در واقع همان $F(C_i)$ بر حسب زمان می باشد.
 پس هم کار به دست آمد و هم $[g(C_i)]$.

حالت خاص

t	C _A
0	C _{A0}
1	C _{A1}
2	C _{A2}
3	C _{A3}

مثال 1 : دانش ابتدایی در حال زود داریم :
 می خواهیم سهم جدول مقابل مستقیم (تجربه) فرض کنیم، آیا می شود؟
 مثال + مسئله :

$$-r_A = k f(C_A)$$

$$-r_A = \frac{dC_A}{dt} = k C_A$$

$$-\frac{dC_A}{C_A} = k dt$$

در صورتی که C_A ها

مشابه :

در ابتدا این برود می توانیم تابع $\frac{1}{C_A}$ بر حسب C_A رسم کنیم و ... (همان روشی که مثال قبل)

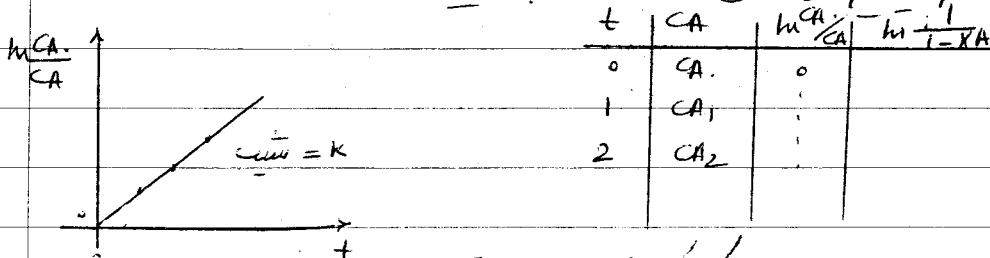
$$\ln \frac{C_A}{C_{A0}} = -kt$$

$$-\ln \frac{C_A}{C_{A0}} = \ln \frac{C_{A0}}{C_A} = kt$$

$F(C_i)$

توجه کنید :

$F(C_i)$ بر حسب t رسم کنیم و اگر خطی شود که از مبدأ می گذرد و شیب آن برابر با k است.



در مثال برای $\ln(C_A)$ با رسم t رسم کردیم و در صورتی که جدول از مبدأ می گذرد و شیب آن برابر با k است.
 این مثال بود (همان روشی که در ابتدا) در روش استقرایی در batch در حالت حجم ثابت بررسی می کردیم.

$$X_A = \frac{N_A - N_A}{N_A} \implies N_A = N_A \cdot (1 - X_A) \quad 1.$$

در بسیاری موارد می توان موازنه سرعت را بر اساس تبدیل رسم کرد:

$$\frac{N_A}{V} = \frac{N_A \cdot (1 - X_A)}{V}$$

$v = -\frac{dC_A}{dt}$ بنابر: $C_A = C_{A0} \cdot (1 - X_A)$, $X_A = 1 - \frac{C_A}{C_{A0}}$

$$-k(1 - X_A) = k \frac{1}{1 - X_A} = kt$$

مسئله های مستقیم هم از سؤال چهارم استفاده کرد

2.

و از روش دیگر سؤال از ابتدا از تبدیل استفاده کرد:

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k C_A$$

$$-r_A = C_{A0} \cdot \frac{dX_A}{dt} = k C_{A0} \cdot (1 - X_A)$$

$$\frac{dX_A}{dt} = k(1 - X_A) \xrightarrow{\text{انتگرال}} \frac{dX_A}{1 - X_A} = k dt \implies -\ln(1 - X_A) = kt$$

روش ها 1 و 2 نتیجه مشابهی دارند (1 به 2 و 2 به 1 قابل تبدیل)

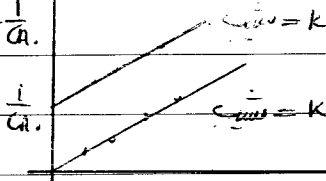
سؤال 2 - جدول خوبی برایش استفاده می شود سرعت واکنش در دو نقطه است که برابر است:

$$2A \rightarrow 2R$$

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k C_A^2$$

$$-dC_A = k C_A^2 dt \implies \left(-\frac{1}{C_A}\right) C_{A0} = kt \implies \frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A0}} = kt$$

t	C _A	$\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A0}}$	$\frac{X_A}{1 - X_A} \cdot \frac{1}{C_{A0}}$
0	C _{A0}	0	
1	C _{A1}		
2	C _{A2}		
...			



خط اول از مبدأ گذرد؛ البته می توانستیم به رسمیم

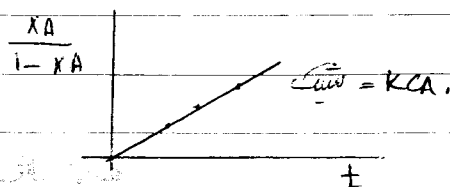
1/C_A (بر حسب t) رسم کنیم

$$\frac{1}{C_A} = kt + \frac{1}{C_{A0}}$$

$$\frac{C_{A0}}{C_A} - 1 = k C_{A0} \cdot t$$

نیز به سبب:

$$\implies \frac{1}{1 - X_A} - 1 = kt C_{A0} \implies \frac{X_A}{1 - X_A} = kt C_{A0}$$



$$-r_A = C_A \frac{dX_A}{dt} = k C_A^2 (1 - X_A)^2 \quad : b$$

$$\dots \quad \text{معادله (1) :} \quad \frac{X_A}{1 - X_A} = k t C_A \quad (\text{روشن})$$

A + B → جابجایی			
t	C _A	X _A = 1 - $\frac{C_A}{C_{A0}}$	E = $k \frac{M - X_A}{M(1 - X_A)}$

مسئله ۳ - فرض کنید در استاریند راست داریم
فرض استای در دو نوع مواضع راست :

$$-r_A = k C_A C_B = -\frac{dC_A}{dt}$$

$$-r_A = -r_B$$

$$\left(\frac{dn_i}{V} \right) = \dots$$

$$\rightarrow -\frac{dC_A}{dt} = -\frac{dC_B}{dt}$$

در این حالت شرط نیاز ندارد
در این مثال با هم رابطه را برابری می‌کنیم :

$$C_A \cdot dX_A = C_B \cdot dX_B$$

$$C_A \cdot X_A = C_B \cdot X_B$$

رابطه نسبت ماده صوری A از قبل بوده (C_A · X_A) (استان ماده صوری) :

$$C_A = C_{A0} - C_A \cdot X_A$$

$$C_B = C_{B0} - C_B \cdot X_B$$

در این مثال A و B هر دو راست هستند پس این رابطه درست است (به ازای هر دو طرف معادله)

(از A و B هر دو طرف معادله می‌شود)

والد در این حالت معادله نسبت استوکیومتری را می‌توانیم بنویسیم C_B و C_A مساوی باشد در تمام لحظات C_A و C_B یکی می‌شوند

$$-r_A = C_A \frac{dX_A}{dt} = k C_A (1 - X_A) \times C_A \left(\frac{C_B}{C_A} - X_A \right) \quad M = \frac{C_B}{C_A}$$

$$\Rightarrow \frac{dX_A}{dt} = k C_A (1 - X_A)(M - X_A)$$

تالیق با معادله اول در دو طرف انجام می‌دهیم :

$$\int \frac{dX_A}{(1 - X_A)(M - X_A)} = k C_A \cdot dt$$

$$\int \frac{1}{(1 - X_A)(M - X_A)} = \frac{\alpha}{1 - X_A} + \frac{\beta}{M - X_A} = \frac{\alpha M - \alpha X_A + \beta - \beta X_A}{(1 - X_A)(M - X_A)}$$

$$\Rightarrow \alpha M + \beta = 1$$

$$\alpha + \beta = 0 \Rightarrow \beta = -\alpha \Rightarrow \alpha = \frac{1}{M - 1}, \quad M \neq 1$$

در این فرض یعنی ماده راست استوکیومتری باشد

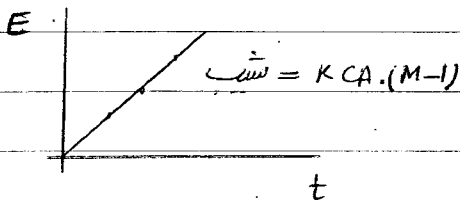
$$\beta = \frac{-1}{M - 1}$$

$$\frac{dx_A}{1-x_A} - \frac{dx_A}{M-x_A} = k_{CA} \cdot (M-1) dt, \quad M \neq 1$$

$$-M(1-x_A) \Big|^{x_A} + M(M-x_A) \Big|^{x_A} = k_{CA} \cdot (M-1) t, \quad M = \frac{C_B}{C_A}$$

$$E = M \frac{M-x_A}{M(1-x_A)} = k(C_B - C_A) t$$

این معادله را می توان به صورت زیر نوشت
 $E = k(C_B - C_A) t$



$$\frac{M-x_A}{M(1-x_A)} = \frac{C_B/C_A - x_A}{M(1-x_A)} = \frac{C_B - C_A \cdot x_A}{M C_A (1-x_A)} = \frac{C_B}{M C_A} \Rightarrow E = M \frac{C_B}{M C_A} \quad ; \quad \underline{\underline{1}}$$

$$= \frac{C_B/C_A - x_A}{C_B/C_A (1-x_A)} = \frac{C_B - C_B \cdot x_A}{C_B (1-x_A)} = \frac{1-x_B}{1-x_A} \Rightarrow E = M \frac{1-x_B}{1-x_A} \quad ; \quad \underline{\underline{1}}$$

$$M=1 \Rightarrow C_B = C_A$$

در این حالت (معمولاً) $M=1$ داریم

$$\begin{aligned} C_A \cdot x_A &= C_B \cdot x_B \\ C_A &= C_A \cdot (1-x_A) \Rightarrow C_A = C_B \Rightarrow -r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k C_A C_B = k C_A^2 \\ C_B &= C_B \cdot (1-x_B) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \frac{x_A}{1-x_A} = k t C_A$$

این معادله را می توان به صورت زیر نوشت

$$E = M \frac{M-x_A}{M(1-x_A)} = k C_A \cdot (M-1) t$$

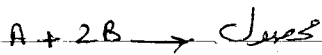
در این حالت $M=1$ داریم
 این معادله را می توان به صورت زیر نوشت

$$M=1 \Rightarrow 0=0 \quad \text{شیب} : \frac{M(M-x_A) - M^2(1-x_A)}{M-1} = k C_A \cdot t$$

$$\frac{1}{M-x_A} - \frac{1-x_A}{M(1-x_A)} \Big|_{M=1}^0 = \frac{1}{1-x_A} - \frac{1-x_A}{1-x_A} = \frac{1}{1-x_A} - 1 = \frac{x_A}{1-x_A}$$

$$= k C_A \cdot t$$

این معادله را می توان به صورت زیر نوشت



مسئله ۴ -

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k C_A C_B$$

$$\frac{-r_A}{1} = \frac{-r_B}{2} \Rightarrow \frac{C_A \cdot X_A}{1} = \frac{C_B \cdot X_B}{2}$$

برای حل مسئله ۴، فرض می‌کنیم که در هر لحظه، مقدار A و B از یک منبع است و در هر لحظه مقدار A و B در هر لحظه ...

جواب برای

$$\Rightarrow \ln \frac{C_B}{M C_A} = \ln \frac{C_B C_A}{C_B \cdot C_A} = \ln \frac{M - 2X_A}{M(1 - X_A)} = C_A \cdot (M - 2) \cdot k t, M \neq 2$$

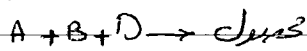
$M=2$

$$\ln \frac{1}{C_A} = \ln \frac{1}{C_A} = \ln \frac{1}{C_A} \times \frac{X_A}{1 - X_A} = 2 k t$$

$$C_A = C_B$$

$$C_B = 2 C_A$$

جواب برای



مسئله ۵ - واکنش درجه ۳

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k C_A C_B C_D$$

$$\frac{-r_A}{1} = \frac{-r_B}{1} = \frac{-r_D}{1}$$

$$-dC_A = -dC_B = -dC_D$$

$$C_A \cdot X_A = C_B \cdot X_B = C_D \cdot X_D$$

$$C_B = C_{B_0} - C_A \cdot X_A$$

$$C_D = C_{D_0} - C_A \cdot X_A$$

$$\Rightarrow -r_A = C_A \cdot \frac{dX_A}{dt} = k C_A \cdot (1 - X_A) \times C_A \cdot \left(\frac{C_{B_0}}{C_A} - X_A\right) \times C_A \cdot \left(\frac{C_{D_0}}{C_A} - X_A\right)$$

$$(*) \text{ جواب برای } : \frac{1}{(C_{A_0} - C_{B_0})(C_{A_0} - C_{D_0})} \ln \frac{C_A}{C_A} + \frac{1}{(C_{B_0} - C_{D_0})(C_{B_0} - C_{A_0})} \ln \frac{C_{B_0}}{C_B} + \frac{1}{(C_{D_0} - C_{A_0})(C_{D_0} - C_{B_0})} \ln \frac{C_{D_0}}{C_D} = k t$$

$$C_{D_0} \gg C_{A_0}, C_{D_0} \gg C_{B_0}$$

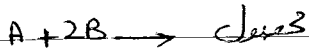
حالت ویژه: $C_{D_0} \gg C_{A_0}, C_{D_0} \gg C_{B_0}$

این روش برای حل مسائل از نوع واکنش‌های پیوسته است

$$(*) \Rightarrow \frac{1}{(C_{A_0} - C_{B_0}) \times (-C_{D_0})} \ln \frac{C_A}{C_A} + \frac{1}{(-C_{D_0})(C_{B_0} - C_{A_0})} \ln \frac{C_{B_0}}{C_B} + 0 = k t$$

$$\Rightarrow \ln \frac{C_B}{M C_A} = \ln \frac{C_B C_A}{C_B \cdot C_A} = k C_{D_0} (C_{B_0} - C_{A_0}) t, M = \frac{C_{B_0}}{C_{A_0}}$$

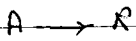
جواب برای حالت ویژه واکنش $A + B \rightarrow \text{جواب}$ در صورتی که $C_{D_0} \gg C_{A_0}, C_{D_0} \gg C_{B_0}$



$r_A = -k C_A C_B^2$

$\frac{-r_A}{1} = \frac{-r_B}{2} \Rightarrow C_A \cdot x_A = \frac{C_B \cdot x_B}{2}$

مسئله حل کردن و حفظ را برای فرضی در سوال و در سوال از ابتدا درجه ن درین
کرد و در نهایت در ابتدا الکتری برای n درین و حفظ انجام داد.



مثال 7 - دانستن درجه n

$r_A = -\frac{dC_A}{dt} = -kC_A^n$

$\frac{-dC_A}{C_A^n} = k dt \Rightarrow -C_A^{-n} dC_A = k dt$

$\Rightarrow \int_{C_A}^C -C_A^{-n} dC_A = \int_0^t k dt \Rightarrow \frac{1}{1-n} [C_A^{1-n}]_{C_A}^C = kt, n \neq 1$

$\Rightarrow \frac{C_A^{1-n}}{1-n} - \frac{C_A^{1-n}}{1-n} = k(1-n)t \Rightarrow F(C_A) = \frac{C_A^{1-n} - C_A^{1-n}}{1-n} = kt$

مثال 8

از این جا به بعد درین و حفظ برای n شروع میشود.

$n = 1 \Rightarrow \ln \frac{C_A}{C_A} = kt$

و کارالین از روش استی است، n هم لزوماً 1 یا 2 (در صورتی است)
حال n را چنان درین تعیین که F(CA) در صورت + حفظ شود

$C_A^{1-n} - C_A^{1-n} = k(1-n)t$

صورت $n > 1$:

$n > 1$ شرط حفظ می شود $\Rightarrow \frac{1}{C_A^{n-1}} - \frac{1}{C_A^{n-1}} = k(1-n)t$

$\Rightarrow \frac{1}{C_A^{n-1}} - \frac{1}{C_A^{n-1}} = k(n-1)t \quad C_A = 0 \Rightarrow t = \infty$

یعنی اگر درجه واکنش از 2 باشد و الی غیره از این است و الی غیره از این است

$n = 1 \Rightarrow C_A = 0, t = \infty$

صورت $n = 1$:

" " " " " " " "

$C_A^{1-n} - C_A^{1-n} = k(1-n)t$

صورت $n < 1$:

$C_A = 0 \Rightarrow t = \frac{C_A^{1-n}}{k(1-n)}$

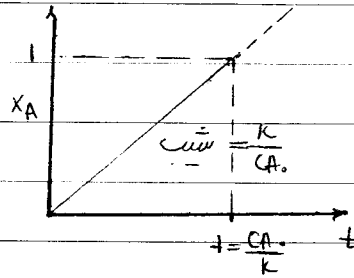
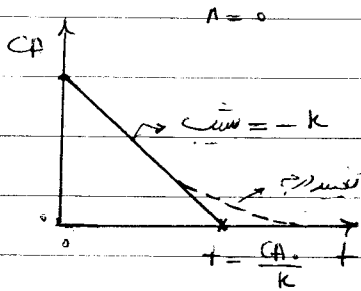
یعنی اگر درجه واکنش از یک کمتر باشد در یک زمان کمتری به پایان می رسد.

صافیت ضلعی $n=1$: $A=0 \implies -r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k C_A^1 = k$

$-dC_A = k dt$

$C_{A0} - C_A = kt \quad \text{یا} \quad C_A \cdot X_A = kt$

$\implies C_A = 0 \implies t = \frac{C_{A0}}{k}$

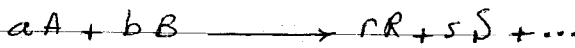


حکم ریاضی

اشاره حکم ریاضی : صافیت $n=1$ تمام می شود و تضاد این بر فرضیات فرضیه دیده می شود.
 در چنین تضادهای باید دانست که در حکم ریاضی فرضیه مقدار داده ام و باقی فرضیه نیست پس می توانم
 در حالتی در فرضیه فرضیه نداشته ام که این فرضیه ثابت بود n در این فرضیه فرضیه
 ثابت $n=1$ و کمترین از $n=1$: تمام شده و واکنش به پایان می رسد اما در واقع واکنش تغییر در
 می دهد (واکنش از درجه صفر به درجه یک می آید! شیب پیدا میکند).

سوال : آیا سوال از فصل و خطا بر چندتا ؟

مثال ۸ - واکنش $A + B \rightarrow R + S + \dots$ درجه کلی واکنش ؟



$-r_A = k_A C_A^\alpha C_B^\beta \dots$

درجه کلی واکنش $n = \alpha + \beta + \dots$

برای این که β بزرگتر از α ظاهر نشود :

این حالتی است که موارد نسبت استوکیومتری بزرگتر شود و واکنش نسبت استوکیومتری انجام
 می شود مثلاً $A + B \rightarrow$ محصول

$C_B = C_{B0} - C_{A0} \cdot X_A$

$C_{B0} = C_{A0} \implies C_B = C_A$

$C_A = C_{A0} - C_{A0} \cdot X_A$

در تمام لحظات موارد نسبت استوکیومتری باقی خواصدهند

$$\Rightarrow \frac{-r_A}{a} = \frac{-r_B}{b} \Rightarrow \frac{C_A \cdot X_A}{a} = \frac{C_B \cdot X_B}{b}$$

$$C_B = C_B - C_B \cdot X_B = C_B - \frac{b}{a} C_A \cdot X_A$$

$$C_A = C_A - C_A \cdot X_A \rightarrow \left[C_B = \frac{b}{a} C_A \cdot \frac{C_A}{a} \quad \frac{C_A}{a} = \frac{C_B}{b} \right] \text{ : افتراض حالت}$$

$$\Rightarrow C_B = \frac{b}{a} (C_A - C_A \cdot X_A) = \frac{b}{a} C_A \Rightarrow \frac{C_B}{C_A} = \frac{b}{a}$$

سین اگر از اول مواد به نسبت استوکیومتری ریخته شده باشد و چون واکنش به نسبت استوکیومتری انجام

$$\text{می شود : } \frac{C_B}{C_A} = \frac{b}{a}$$

لاگاریتم

$$\Rightarrow -r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k \left(\frac{b}{a}\right)^{\alpha+\beta+\dots} C_A$$

$$\Rightarrow n = \alpha + \beta + \dots$$

$$\hookrightarrow -\frac{dC_A}{dt} = k C_A^n$$

حل معادله دیفرانسیل و خط \$n\$ را با نسبت کوریم از روش زیر پیدا می کند :

$$C_A^{1-n} - C_A_0^{1-n} = k(1-n)t$$

$$\text{در } t = t_{1/2} : C_A = C_A_0/2 \Rightarrow t = t_{1/2}$$

$$\Rightarrow C_A_0^{1-n} - \left(\frac{C_A_0^{1-n}}{2^{1-n}}\right) = k(1-n)t_{1/2} \quad n \neq 1$$

$$(C_A_0^{1-n}) \left(1 - \frac{1}{2^{1-n}}\right) = k(1-n)t_{1/2} \quad \frac{1}{2} + t_{1/2} = \frac{C_A_0^{1-n} \left(\frac{2^{1-n}-1}{2^{1-n}}\right)}{k(1-n)}$$

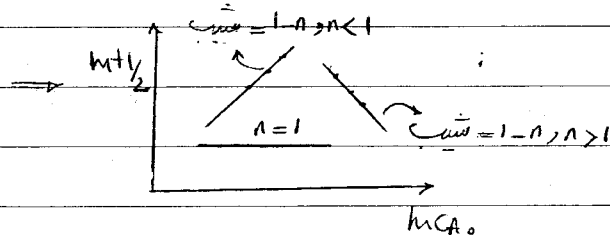
طریقه
تعیین

$$\ln t_{1/2} = (1-n) \ln C_A_0 + M \rightarrow \text{خط مستقیم}$$

طریقه
تعیین

C_A_0	$t_{1/2}$
⋮	⋮
⋮	⋮

خط مستقیم
از شیب آن، \$n\$ یا \$C_A\$ های مختلف انجام می شود (تقریباً)



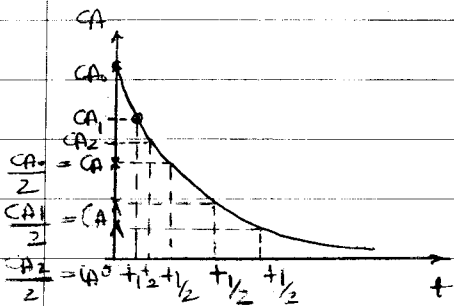
$$n=1 : \ln \frac{C_A_0}{C_A} = kt \rightarrow C_A = C_A_0/2 \Rightarrow \ln 2/k = t_{1/2}$$

$$\Rightarrow t_{1/2} = \frac{0.693}{k}$$

درجه اول یعنی هر چه غلظت اولیه بیشتر باشد

دوره نصف عمر : هر چه غلظت بیشتر باشد در \$n > 1\$ ، \$t_{1/2}\$ کاهش می یابد و در \$n < 1\$ ، \$t_{1/2}\$ افزایش می یابد

نکته اول: در روش خلقت سنجی یک ارزش بیشتر انجام نمی‌داریم و در این مسئله هم (بویض) ظاهر آن نوشته شده) انجام یک ارزش کافی است و حال می‌خواهیم ارزش خلقت سنجی قبول این مسئله برسیم از طریق صفر اولی زمان که برای روش عمل می‌کنیم:



+	CA
t ₀	CA ₀
t ₁	CA ₁
t ₂	...

بر عوارض هم دیده می‌شود که از شرط اول عمل خلقت سنجی مستقیم عمل زیر رسیده

CA ₀	t _{1/2}
-----------------	------------------

CA₁ و CA₀ است و مبدأ ارزش صفر می‌باشد (در نقطه t₀) در هر مرحله t را از t₀ جدا می‌کنیم

نکته دوم: آیا الزاماً با نسبت زمان 1/2 بعد از آن مسئله حساب کرد؟
 بعد از روش 1/3 و 1/4 ... هم قابل عمل است. بسته به کنی یا کنی داشتن دارد مثلاً اگر روش کنی باشد پس 1/2 بعد طولانی می‌شود و بعد است مثلاً زمان 1/50 بعد از آن در نظر بگیریم

نکته سوم: برای تعیین روح مخفی نسبت به هر سازنده (بزرگ یا کوچک نسبت به سازندهها) یعنی α , β و ... آیا می‌توان از روش کنی بعد استاده کرد؟
 بله، باید به سطح روش افزودنی برسیم. در این حالت معادله کنی و حاصلیم روح مخفی آن را در دست آوریم، به مقدار خوبی برسیم.

$\alpha = 7$ " مثلا $\rightarrow CB \gg CA$.

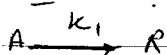
$\rightarrow r_A = - \frac{dCA}{dt} = k' C_A^x$

α و β و ... مقدار می‌گیرد و حال طریق کنی را تعیین می‌کنیم، α را تعیین می‌کنیم (روش کنی $\alpha = n$) قابل تعیین شد و بعد ارزش برای n های دیگر می‌توانیم

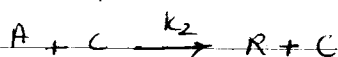
صنایع از روش های مختلف:

واکنش کاتالیزوری معکوس:

در این جا در واقع بار واکنش مواج می‌سیم بی خود واکنش و بی واکنش با وجود کاتالیزور



$-r_{A1} = k_1 C_A$



$-r_{A2} = k_2 C_A C_C$

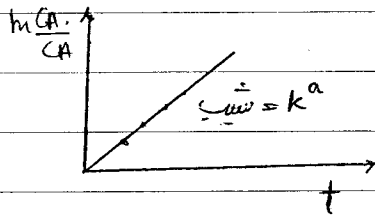
$$\Rightarrow -r_A = -\frac{dCA}{dt} = \underbrace{(k_1 + k_2 C_C)}_{k^a \approx k_{obs}} CA = k^a CA$$

استدلال

$$\Rightarrow \ln \frac{CA_0}{CA} = k^a t$$

هدف: محاسبه k_1 و k_2 و محاسبه k^a یا k_{obs} در دو مرحله

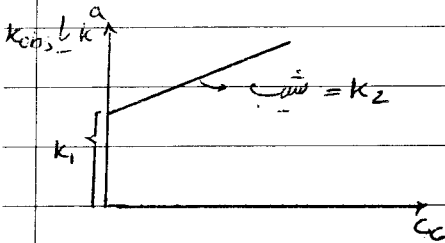
t	CA
0	CA ₀
1	CA ₁
2	CA ₂
⋮	⋮



در هر مرحله استاندارد از زمان صاف شدن
سه مرحله در دو مرحله اول در دو
روم درست است.

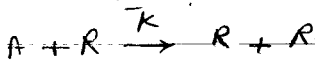
هدف دوم: تعیین شرایط برای تعیین k_1 و k_2 :

با تغییر غلظت C_C تا تغییر k_{obs} کند. با رسم k_{obs} بر حسب C_C ، k_1 و k_2 بدست می آید



مثال: واکنش اتوکاتالیزی:

$A \rightarrow R$
اتوکاتالیزی یعنی خود کاتالیزی: محصول حاصل کاتالیزور است.
که معمولاً آنقدر ناچیز نیست ضروری که گویا اصلاً پیش نمی رود مگر اینکه در ابتدا R داشته باشیم



(مثلاً برای حفظ صافیت، تا صافیت نباشد واکنش پیش نمی رود)

$$-r_A = -\frac{dCA}{dt} = k CA C_R$$

اگر $C_R = 0$ واکنش اصلاً پیش نمی رود

$$CA_0 + C_{R_0} = CA + C_R = C_0$$

با تولید R، A کمتر و واکنش بیشتر پیش می رود

محصول حاصل است که غلظت آن در طول واکنش در دو لحظه صافیت است

$$C_R = C_0 - CA$$

C_R تابعی از CA است که در حال صافیت است

$$-\frac{dCA}{dt} = k CA (C_0 - CA)$$

$$\frac{dCA}{CA(C_0 - CA)} = k dt \Rightarrow \frac{1}{CA(C_0 - CA)} = \frac{1}{C_0} \left(\frac{1}{CA} + \frac{1}{C_0 - CA} \right)$$

استدلال

$$\ln \frac{CA_0 C_R}{CA C_{R_0}} = \ln \frac{C_R}{M CA} = k_1 (CA_0 + C_{R_0}) t$$

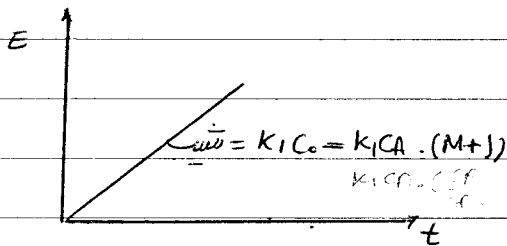
$$M = \frac{C_{R_0}}{CA}, C_R = C_0 - CA$$

حال باید منحنی را رسم کنیم که باید خطی شود که از مبدأ میگذرد (I)

$$-dCA = dCR \Rightarrow CA \cdot XA = -CR \cdot XR$$

برای محاسبات هم مسائل لا اوتریف کردیم که تغییرات کمالات و کمالات را در نظر میگیریم یعنی مقدار A ای که از آن عبور میکنیم حال منحنی R را در نظر میگیریم.

$$Or (I) \rightarrow E = M \frac{CA \cdot CR}{CR \cdot CA} = M \frac{CA \cdot X(CR_0 + CA \cdot XA)}{CR_0 \cdot XCA} = M \frac{CA \cdot X(M + XA)}{\frac{CR_0}{CA} \cdot XCA} = M \frac{M + XA}{M(1 - XA)} = k_1 CA \cdot (M+1)t$$



حال E با M در محاسبه ترسیم میکنیم. نقاط بحرانی از جدول غنای نسبی گرفته اند که در این محاسبات استفاده شده اند.

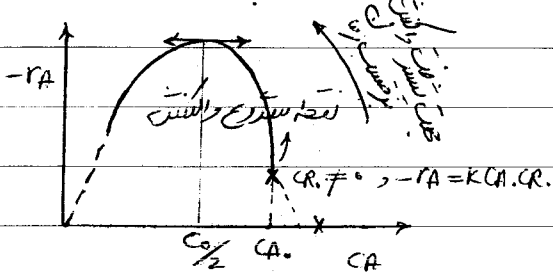
عنوان خط شده پس جدول را باید میخواند. حال در خواصم $RA = \text{max}$ را رسم کنیم (استیلا k_1)

$$-RA = k_1 CA (C_0 - CA) = k_1 CA CR$$

$$\frac{d(-RA)}{dCA} = 0 \Rightarrow C_0 - CA - CA = 0 \Rightarrow CA = \frac{C_0}{2} \quad (II)$$

قضیه اول مجموع دو توانی متضاد است با هم حاصل میگیریم و توانی طایفه هم میخواند که برابر باشند.

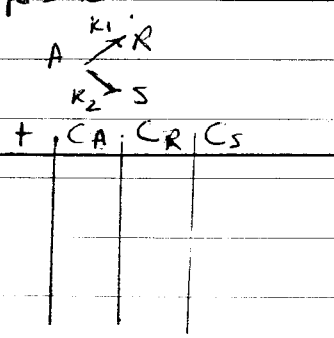
$$CA + CR = \text{ثابت} = C_0 \quad \text{Max} =$$



وقتی نقطه شروع کاسی X نقطه X باشد یعنی در آغاز کار جدولی R داریم و $RA = 0$ می شود.

عنوان باقی در جدول (II) کشیده شده است (باقی در کم شدن CA و مقدار دلال جان)

مثال (ب)



مثال (ب) واکسین ملک واریتاتی : در وجه اول در اول منحنی میکنیم

$$-RA_1 = \left(-\frac{dCA}{dt}\right)_1 = k_1 CA$$

$$-RA_2 = \left(-\frac{dCA}{dt}\right)_2 = k_2 CA$$

$$\Rightarrow -RA = \frac{dCA}{dt} = (k_1 + k_2) CA$$

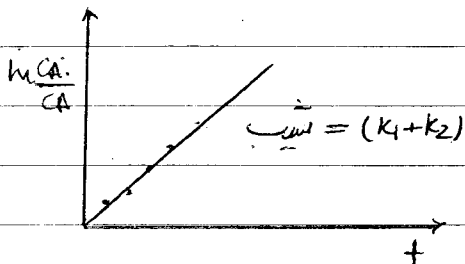
معادله اول : $k_1 \frac{CA_0}{CA} = (k_1 + k_2)T \Rightarrow \frac{CA}{CA_0} = e^{-(k_1 + k_2)t}$

$r_R = \frac{dCR}{dt} = k_1 CA = k_1 CA_0 e^{-(k_1 + k_2)t}$

$dCR = k_1 CA_0 e^{-(k_1 + k_2)t} dt$

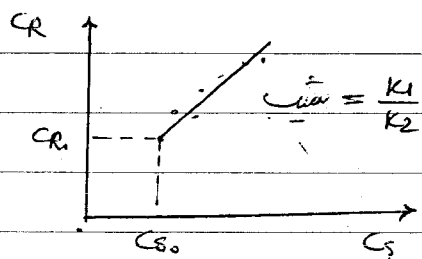
$CR - CR_0 = \frac{k_1 CA_0}{(k_1 + k_2)} (1 - e^{-(k_1 + k_2)t})$ (1) تابع CR و زمان

$CS - CS_0 = \frac{k_2 CA_0}{(k_1 + k_2)} (1 - e^{-(k_1 + k_2)t})$ (2) تابع CS و زمان



برای مقایسه k_1 و k_2 :
 بهترین کار تقسیم (1) بر (2) می باشد

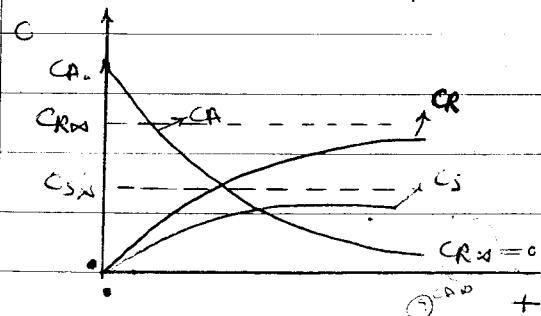
$\frac{CR - CR_0}{CS - CS_0} = \frac{k_1}{k_2}$



این خط رابطه بین CR و CS است

نسبت CR و CS :

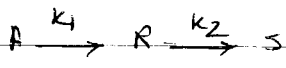
صورت خاص : $k_1 > k_2$ و $CR_0 = 0$ ، $CS_0 = 0$



$CR_{\infty} = \frac{k_1 CA_0}{k_1 + k_2}$

$CS_{\infty} = \frac{k_2 CA_0}{k_1 + k_2}$

نتیجه : $CA + CR + CS = CA_0 + CR_0 + CS_0 = CA_0$



مسئله - واکنش متوالی سری :

هدف : تابع های معمولی برای نسبت CR, CS
 با فرض درجه اول بودن واکنش ها

$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k_1 C_A$ (1)

$r_R = \frac{dC_R}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_R$ (2)

$r_S = k_2 C_R = \frac{dC_S}{dt}$

1) $\Rightarrow \frac{C_A}{C_{A_0}} = e^{-k_1 t}$

2) $\Rightarrow \frac{dC_R}{dt} + k_2 C_R = k_1 C_A$ معادله تفاضلی درجه اول با ضرایب متغیرات

شکل کلی : $\frac{dy}{dx} + P(x)y = Q(x)$

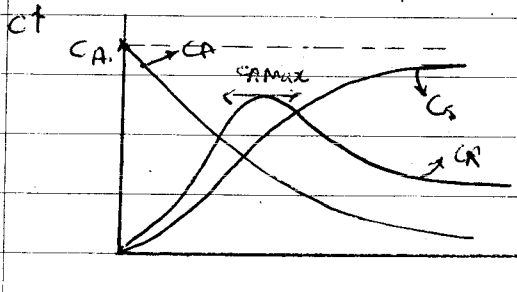
ضرایب متغیرات : $e^{\int P(x) dx}$

$x e^{k_2 t} \xrightarrow{\text{ضرایب متغیرات}} x e^{-k_2 t} \xrightarrow{\text{ضرایب متغیرات}} \frac{C_R}{C_{A_0}} = \frac{k_1}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t})$ (با شرط $k_1 \neq k_2$)

در این گونه واکنش ها معمولاً محصول مطلوب را نسبت به سایر اجزا تولید می کنند و با صرف بیشتر

برای تعیین C_S :
 راه اول - راه معادله فرقی
 راه دوم -

$C_{A_0} + C_R + C_S = C_A + C_R + C_S = C_{A_0}$
 $\Rightarrow C_S = C_{A_0} \left(1 - \frac{k_2}{k_2 - k_1} e^{-k_1 t} + \frac{k_1}{k_2 - k_1} e^{-k_2 t} \right)$



$C_{A_0} = 0$
 $C_{R_{max}} = 0$
 محل $S=R$ در $t = t_{max}$
 (استاد محترم صفت است اما در اینجا منظور از t_{max} زمان رسیدن به بیشترین مقدار است)

CR تا زمانی که $\frac{dC_S}{dt} = k_2 C_R$ تا زمانی که $\frac{dC_S}{dt}$ صفر می شود، S است
 تا زمانی که تولید می شود.

اگر در این batch استاده کنیم صرف نیست اما در t_{max} یعنی زمانی که CR تا زمانی که $\frac{dC_S}{dt}$ صفر می شود
 است و اگر R مانده مطلوب باشد با t_{max} باید استاده آورده و واکنش را در این حالت وقت کنیم.

برای t_{max} $\frac{dC_R}{dt} = 0 \Rightarrow t_{max}$ و خواص را است :

$$\frac{dCR}{dt} = 0 \implies \frac{k_1}{k_2} \text{ عکس متوسطه کربن (} k_1 \neq k_2 \text{)} \implies t_{max} = \frac{\ln(k_2/k_1)}{k_2 - k_1}$$

(در $k_1 = k_2$ ، تابع CR (بسی) می شود، در ابتدا تحت خواصش)

$$\frac{CR_{max}}{CA} = \left(\frac{k_1}{k_2} \right)^{\frac{k_2}{k_2 - k_1}} \leftarrow \text{اشاره کنی } CR_{max} = ? \quad (?)$$

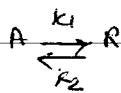
1) $k_2 \gg k_1$ دو حالت خاص:
 $C_s = CA \cdot (1 - e^{-k_1 t})$ R کی باید تولید شود
 C_s تابع k_1 شده است با معنای فیزیکی: هر چه کندتر تغییر کند، سرعت واکنش است.

2) $k_2 \ll k_1$
 $C_s = CA \cdot (1 - e^{-k_2 t})$ سؤال: چگونه می توان درصم واکنش را بیشتر کرد؟
 بر اساس اصول حموله غلظت استیجی.

چنانچه اصول غلظت استیجی سؤال دهد که غلظت ها کم می شوند تا آنجا که سرعت صفر می شود.
 در این صورت فرض برگشت ناپذیری درصم است که اصل رضای است که اصول غلظت
 استیجی سؤال می دهد که غلظت ها همیشه غلظت کم می شود یعنی غلظت ها نسبت به غلظت
 تعادل می روند در این صورت واکنش برگشت پذیر است.

مسائل سری هم فصل سه اول استیل: 1-2-4-5-6-8-9 (واکنش دو گونه ای)
 11 (درصم)

+	CA
0	CA.
1	CA ₁
...	...
∞	CA _∞ = CA _E



سؤال: واکنش برگشت پذیر:

صورت: k_1 و k_2 و مکانیسم سرعت
 اگر واکنش برگشت پذیر بود: $(A \xrightleftharpoons[k_1]{k_2} R)$ $C_{PE} = 0$

$$\frac{dXA}{dt} = k_1(1 - XA)$$

$$\implies -\ln \frac{CA}{CA} = k_1 t \quad \text{یا} \quad -\ln(1 - XA) = \ln \frac{1}{1 - XA} = k_1 t$$

حال اگر واکنش برگشت پذیر باشد و $C_{Ae} \neq 0$:

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_R$$

صورت اول فرض کردیم

$$-r_A = C_A \cdot \frac{dX_A}{dt} = k_1 C_A (1 - X_A) - k_2 C_R (1 - X_R) \quad \text{برای حصول استوکیومتری مساوی ۱}$$

$$C_A \cdot X_A = -C_R \cdot X_R \quad M = \frac{C_R \cdot C_A}{C_A}$$

$$C_A \cdot \frac{dX_A}{dt} = k_1 C_A (1 - X_A) - k_2 (M C_A + C_A \cdot X_A)$$

$$\Rightarrow \frac{dX_A}{dt} = k_1 (1 - X_A) - k_2 (M + X_A)$$

طبق ثابت تعادل k_1 و k_2 مربوط است :

$$K_e = \frac{k_1}{k_2} = \frac{C_{Re}}{C_{Ae}} = \frac{C_R + C_A \cdot X_{Ae}}{C_A - C_A \cdot X_{Ae}}$$

$$\frac{k_1}{k_2} = \frac{M + X_{Ae}}{1 - X_{Ae}} \quad \text{و} \quad X_{Ae} = 1 - \frac{C_{Ae}}{C_{A0}} = \frac{C_A - C_{Ae}}{C_A}$$

در حالت استوکیومتری k_2 را حذف می‌کنیم و بر حسب k_1 می‌توانیم k_2 را حساب کنیم و نسبت است :

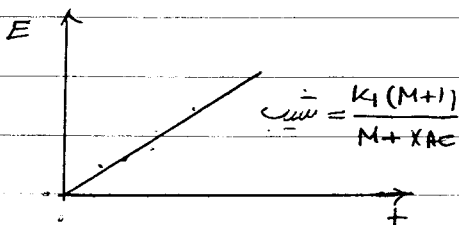
$$k_2 = k_1 \frac{1 - X_{Ae}}{M + X_{Ae}}$$

$$\text{در حالت استوکیومتری} \quad \frac{d(X_A/X_{Ae})}{dt} = \frac{k_1 (M+1)}{M+X_{Ae}} \left(1 - \frac{X_A}{X_{Ae}}\right) \quad \text{در حالت استوکیومتری}$$

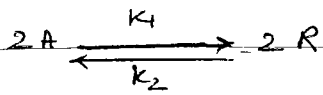
که $X_{Ae} = 1$ (حالت برگشت پذیر در حالت استوکیومتری)

$$\text{میان زمانی} \quad \tau = k_1 \frac{C_A - C_{Ae}}{C_A - C_{Ae}} = k_1 \left(1 - \frac{X_A}{X_{Ae}}\right) = \frac{k_1 (M+1)}{M+X_{Ae}}$$

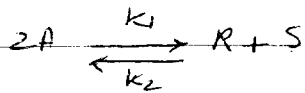
میان برگشت پذیر مانند برگشت پذیر است که ثابت k_1 و k_2 ثابت است و در حالت استوکیومتری $X_{Ae} = 1$ و $M = 1$ و $\tau = \frac{k_1 (M+1)}{M+X_{Ae}}$ تبدیل می‌شود



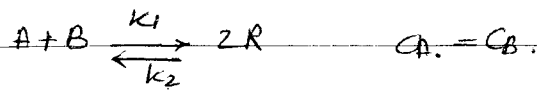
با نسبت اول k_1 و k_2 هم نسبت می‌آید و با جایگزینی معادله نسبت به نسبت می‌آید



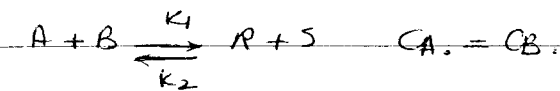
مثال - این چهار حالت احتمالاً یکی می شود



معمولاً

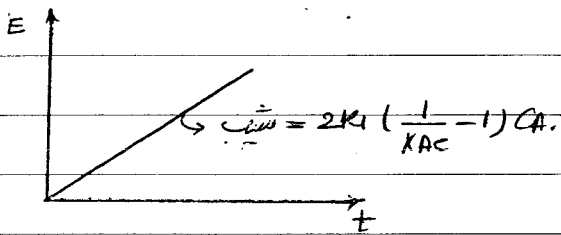


7



در این دو مورد

$$E = k_1 \frac{X_{Ae} - (2X_{Ae} - 1) X_A}{X_{Ae} - X_A} = 2k_1 \left(\frac{1}{X_{Ae}} - 1 \right) C_A t$$



که در هر دو مورد یک است

مجلس بازرگ

مثال - واکنش های که با تغییر درجه همبستگی

الف - تغییر درجه اینها طبق به مثال

$$-R_A = \frac{k_1 C_A^m}{1 + k_2 C_A^n}$$

در صورتیکه : $k_2 C_A^n \gg 1 \Rightarrow -R_A = \frac{k_1}{k_2} C_A^{m-n}$

درجه m-n است

در حالتیکه : $k_2 C_A^n \ll 1 \Rightarrow -R_A = k_1 C_A^m$

درجه m است

$$k_2 C_A^n \approx 1 \Rightarrow -R_A = \frac{k_1 C_A^m}{1 + k_2 C_A^n}$$

در صورتیکه واکنش های شیمیایی در این مثال حالت m=n=1 است

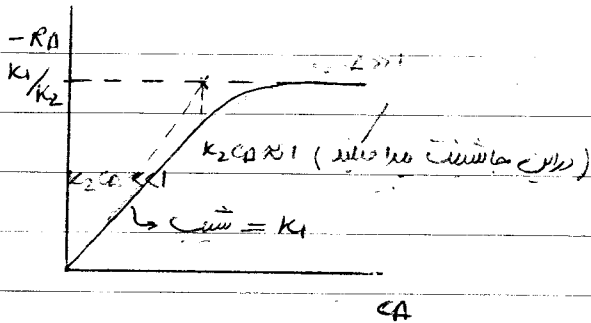
$$-R_A = \frac{k_1 C_A}{1 + k_2 C_A}$$

در صورتیکه واکنش های شیمیایی با ثابت سرعت یک و دو ثابت می شود

در حالتیکه : $k_2 C_A \gg 1$ $\Rightarrow -R_A = k_1/k_2$

در حالتیکه : $k_2 C_A \ll 1$ $\Rightarrow -R_A = k_1 C_A$

و از طرفی همواره داریم $-RA = \frac{dCA}{dt}$ و با جدول نسبت نسبی متغیر RA را بر حسب CA یا نسبت آورد



کار انجام شده در این جا را مختل (تغییر نسبی) نامیده می شود چون از طریق تحلیل نسبت متغیر k_1 و k_2 را بدست آوردیم. در روش استوکیومتری:

t	CA	$\frac{\ln CA_0/CA}{CA_0 - CA}$	$\frac{t}{CA_0 - CA}$

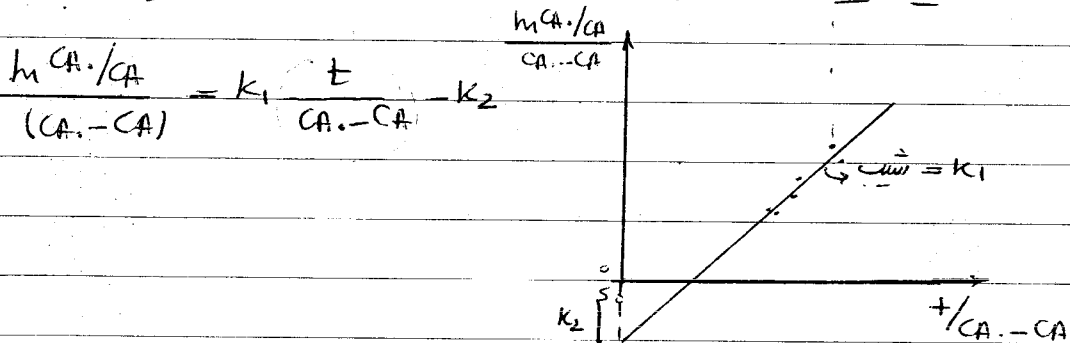
$$\frac{dCA}{dt} = \frac{k_1 CA}{1 + k_2 CA}$$

$$\Rightarrow \frac{-dCA}{CA} = \frac{k_1 dt}{1 + k_2 CA}$$

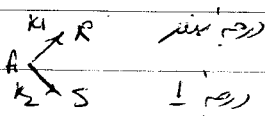
$$\frac{-dCA}{CA} - k_2 dCA = k_1 dt \Rightarrow \ln \frac{CA_0}{CA} - k_2 (CA - CA_0) = k_1 t$$

$$\ln \frac{CA_0}{CA} = k_1 t + k_2 (CA - CA_0)$$

برای بدست آوردن خط مستقیم با شیب برابر k_1 نسبت به $\frac{\ln CA_0/CA}{CA_0 - CA}$ رسم کنیم



در داده های تجربی این خط را رسم کردند و نسبت درست است.



ب - تغییر درجه آزادی به این صورت :
از جدول واکنش های مرکب صورتی جدول

$$CA - RA = \frac{dCA}{dt} = k_1 + k_2 CA$$

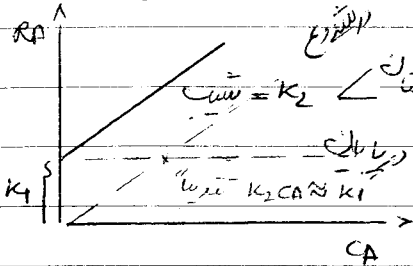
سین عمل در جدول کار :

$$k_2 CA \gg k_1 : RA = k_2 CA$$

$$k_2 CA \ll k_1 : -RA = k_1$$

در جدول کار :

از طریق جدول غلظت سنجی $-RA = \frac{dCA}{dt}$ ، از نسبت CA نسبت آوریم



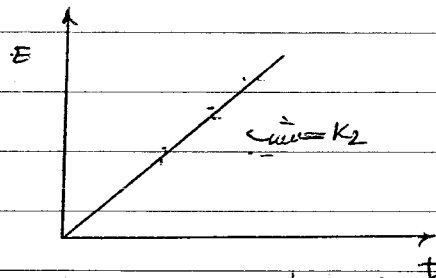
در این نمودار و نسبت RA نسبت آوریم. این است و شیب به نسبت درجه صفر میل می کند. غلظت تقریباً k_1 در صحن شیب در این است نسبت به k_2 بسیار کند.

برای عملی استرالی باید k_1 ، k_2 ، و نسبت آوریم :

$$\frac{dCA}{k_1 + k_2 CA} = dt \Rightarrow \frac{-k_2 dCA}{k_1 + k_2 CA} = \frac{-k_2}{2} dt$$

$$E = \ln \frac{k_1 + k_2 CA}{k_1 + k_2 CA} = k_2 t$$

t	CA	E

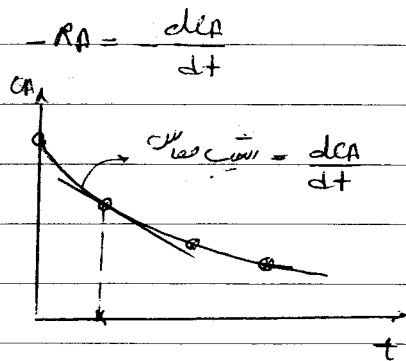


نسبت یک واکنش درجه یک نام است به نسبت اول (یعنی باید نمودار درجه یک را رسم کنیم).
 1- عملی استرالی 2- تحلیل ریزانشی 3- واکنش درجه صفری نسبت انجام شود (آرینولین).
 4- کاتالیزور (جهت اطمینان بیشتر) : تا حدی شیب و واکنش از این طریق انجام می شود و این سرعت را دارد.

روش ریزانشی :

تحلیل ریزانشی در حالت حجم ثابت :

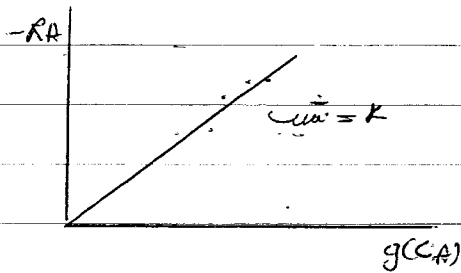
t	CA	$-RA = \frac{dCA}{dt}$
0	CA ₀	
t ₁	CA ₁	
⋮		



این با این معنی است RA ، بسیار کند.

$$1) -RA = -\frac{dCA}{dt} = k f(C) = k g(CA)$$

تا این جا مانند تحلیل استرالی است. نسبتاً از این به بعد استرالی نمی گویم. RA ای که بدون استرالی و بر اساس نسبت نسبت آوریم ، بر حسب $g(CA)$ رسم کنیم لازم :



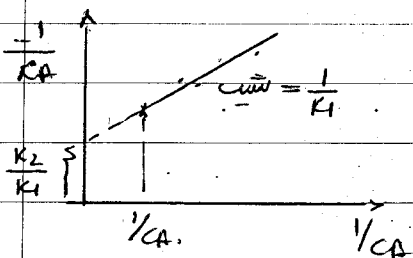
$$2) -RA = -\frac{dCA}{dt} = f(K, C)$$

که در این مثال از نظر ریاضی طرفه مستقیم است ولی از نظر اقتصادی

تألیفی برای $f(K, C)$ معکوس می باشد، $-RA$ را از طریق اختلاف نسبی برداشت می آوریم که $-RA$ بر حسب $f(K, C)$ باید خیلی بشود به نسبت 1 و در غیر این صورت باید حدیث تکثیر شود
 نیست برای تحلیل رفتار نسبی در موردش لازم که روش اول که نسبی و معطایی است در بالا ذکر شد
 روش دوم روش انتگرالی نامیده می شود مثلاً:

$$-RA = \frac{K_1 CA}{1 + K_2 CA} \quad \text{روانش با تغییر درجه}$$

$$\frac{1}{-RA} = \frac{1 + K_2 CA}{K_1 CA} \Rightarrow \frac{1}{-RA} = \frac{1}{K_1 CA} + \frac{K_2}{K_1}$$



حال باید $\frac{1}{-RA}$ بر حسب $\frac{1}{CA}$ خط شود

نسبت CA نسبت به CA است
 CA بیشتر یعنی $1/CA$ کمتر و شروع نسبت به CA است

این معادله برای تحلیل در روش انتگرالی ریاضی حل کرد تا به خط برسیم

$$\textcircled{*} -RA(K_1/K_2) \rightarrow \frac{K_1}{K_2} = \frac{-RA}{K_2 CA} + (-RA)$$

$$\Rightarrow -RA = \frac{-RA}{-K_2 CA} + \frac{K_1}{K_2}$$

$-RA$ را بر حسب $-RA$ رسم می کنیم خطی
 با شیب $\frac{1}{CA}$ نسبت به CA و با عرض از
 مبدأ K_1/K_2 و اگر داده های تجربی هم این خط
 را رسم کردیم پس طرفه در روش اول بود است.

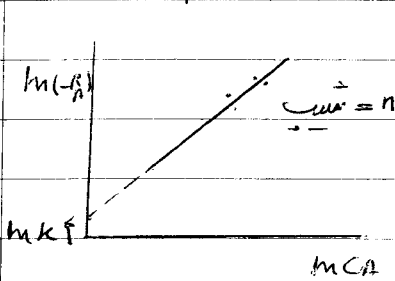
روش تکثیر - زنی (روش دوم):

$$-RA = -\frac{dCA}{dt} = K CA^n$$

حین بر اساس حال جدول اختلاف نسبی مثل می شود

t	CA	$-RA = \frac{dCA}{dt}$	m CA	$m(-RA)$
0	CA ₀			
t ₁	CA ₁			
...				

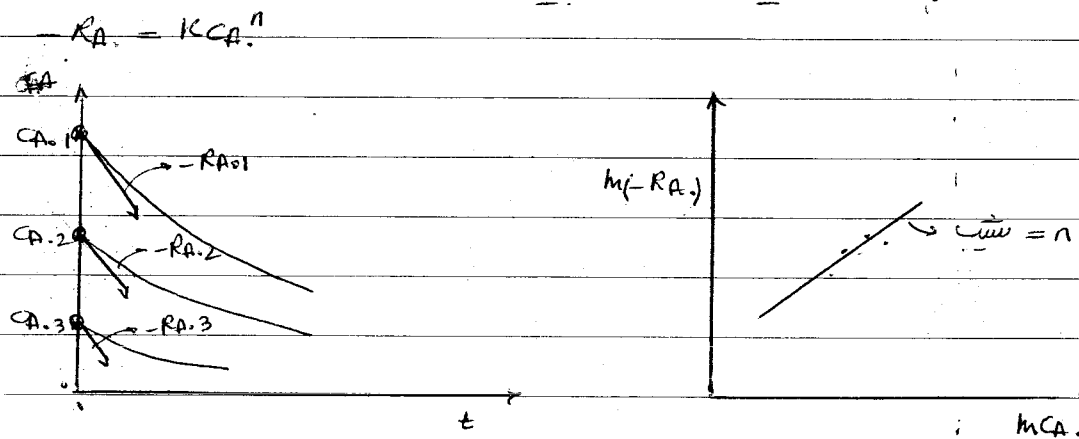
CA و -RA را در رسم دگر n محصول است پس نمودار در این دو خط
 و با یک رسم گسسته داریم:

$$m(-RA) = mK + n m CA$$


در این جا n (شیب) را بدست می آوریم و با مقایسه در این
 نقاط مختلف و از رسم دگر n که خطی مستقیم به ما
 میدهد که رسم نزدیکه در این جا که با ما هم جمع کرده و
 بدین ترتیب نشان تقسیم می کنیم. (یک نقطه حاصل فقط
 اول که همان خطوط اول است با صدمه در نزدیکه
 و با شیب نقاط دو در نزدیکه و n را بدست می آوریم) و مستوی دیگری با
 در جدول بالا در نزدیکه رسم (در مسائل همین طوری داریم که باید باشد و می توانیم
 در رسم بدست آورد)

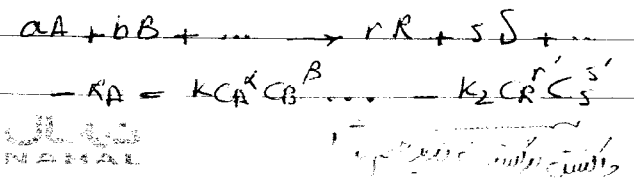
روش سرعتی اولیه (روش چهارم):

در ظاهر مانند روش سوم است. در این روش برای پیدا کردن n از حاصلش با رابطه‌های مختلفی
 انجام می دهیم



شیب هر منحنی را در نقطه اول بدست می آوریم و این را در این روش، روش شیب استفاده می کنند.
 در این حالت یک آزمایش انجام می دهیم زیرا در این صورت به همان روش شیب می توانیم
 پس و آنجا که عمل چند آزمایش انجام می دهیم و چند منحنی مختلف. همان رسم کرده و از آن
 رسم

روش تحلیل جزء جز معادله سرعت (روش پنجم):



در اعشار طروری با A و B مخالف شش در کسینم و عدالت R و S
 $r_A = k_1 C_A C_B^2$
 کم باشد معادل به شش بالا بدل می شود
 یعنی بنا بر A حاصل زیاد، B کم و بنا بر B حاصل زیاد، A کم در نظر می گیریم؛ حال نزدیک افردی
 و در B درست می آید
 اگر اولش برکشت پذیر باشد میتوان برای R و S هم همین طرها را بنویسند.

روش نامی (روش شش):
 در این جا بدین حال که در B و R هم در نظر می گیریم و از طریق در شش عمل می کنیم.
 $r_A = k C_A C_B^2$
 و بعد از این که معادله درست کرد جهت اضمحلال بیشتر از یک عمل در نظر می گیریم و اندرالی استفاده
 می کنیم.

حالت حجم متغیر:
 یعنی مخصوص با فاز گاز و تغییر تعداد مولها در طول زمان می تواند ثابت باشد
 $2A \rightarrow R$ حجم کم می شود $\epsilon = -1$
 $A \rightarrow 2R$ حجم زیاد می شود $\epsilon = 1$
 $2A \rightarrow 2R$ فاز گازی با حجم ثابت
 حجم ثابت شامل فاز جامد و فاز گازی بدون تغییر حاصل می شود.
 $r_A = \frac{1}{V} \frac{dN_A}{dt}$ ، $N_A = C_A V$ (این رابطه حجم ثابت و تغییر بستگی ندارد)

$$\Rightarrow r_A = \frac{1}{V} \frac{d(C_A V)}{dt} \quad , \quad r_A = \frac{dC_A}{dt} + \frac{C_A}{V} \frac{dV}{dt}$$

$$\hookrightarrow r_A = \frac{dC_A}{dt} + C_A \frac{dlnV}{dt}$$

تا اینجا می توانیم از این حالت کلی (برای)
 راحتی ریاضی (پرونده می کنیم)

برای ساده سازی میتوان یک
 تغییر را اینی : $\epsilon_A = \frac{V|_{X_A=1} - V|_{X_A=0}}{V|_{X_A=0} = V_0} = \frac{1-2}{2} = -\frac{1}{2}$
 (تغییر تقسیمی حجمی)
 و نشان دهنده تغییر مقدار حجم در خلال واکنش است
 و تابع واکنش نسبت ضرایب واکنش
 $2A \rightarrow R$ برضای 2 مول A

برای ارزش $2R \rightarrow A$ در صورتی اصول A : $\epsilon = \frac{2-1}{1} = 1$
 $\epsilon = 2$ تابع حضور و غياب هوادری اثر است. تغییر حجم مربوط به صادرات است کننده در ارزش است.
 پس در مثال بالا در غياب هوادری اثر بود
 اعداد مثال $2R \rightarrow A$ ، $\epsilon = 1$ ، $\epsilon = 150$ طریقی اثر نباید ؟
 صادراتی اصول A ، L اصول A فرض کرد

50٪ اثر یعنی 150 هوادری اثر است پس اصول A یعنی اصول : مبدأ اصول A
 طریقی اثر داریم :

3: دو اصول R + اصول C اثر
 2: اصول A + اصول C اثر

$$\epsilon_A = \frac{3-2}{2} = \frac{1}{2}$$

تغییر ϵ تابع است : $\epsilon_A = \frac{3/2 - 1}{1} = \frac{1}{2}$ مبدأ اصول مربوط

تعریف V میزان خطی بودن : $V = V_0 (1 + \epsilon_A X_A) = V_0 + \epsilon_A V_0 X_A$
 اگر V و X_A ثابت باشد (در صورتی که V و X_A ثابت باشند) حجم با تغییر V تغییر میکند صمیمی است

این رابطه طریقی است و برای حجم ثابت و تغییر V

$$\frac{L}{V} \rightarrow NA = NA_0 (1 - X_A)$$

$$\frac{L}{V} \rightarrow \frac{NA}{V} = \frac{NA_0}{V} (1 - X_A)$$

$$CA = \frac{NA_0}{V} (1 - X_A) \xrightarrow{\text{حجم ثابت}} \begin{cases} CA = CA_0 (1 - X_A), V = cte \\ X_A = 1 - \frac{CA}{CA_0} = \frac{CA_0 - CA}{CA_0} \end{cases}$$

این دو فرض همبستگی هستند طریقی ثابت V و $V = cte$

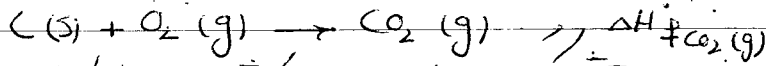
$V \neq cte, V = V_0 (1 + \epsilon_A X_A) \Rightarrow CA = \frac{NA_0 (1 - X_A)}{V_0 (1 + \epsilon_A X_A)}$

$$\Rightarrow CA = \frac{CA_0 (1 - X_A)}{1 + \epsilon_A X_A} \quad (1)$$

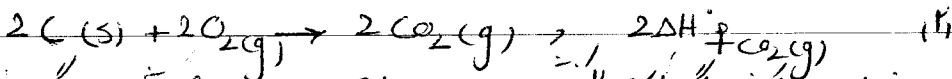
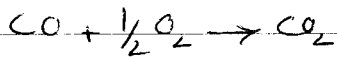
برای روابط اگر ϵ_A را حضور و غياب در صمیمی (در صورتی که V و X_A ثابت باشند) باید روابط مشتاق برای حجم ثابت برداشت
 نباید

طریقی و مستقیم $X_A = \frac{1 - CA/CA_0}{1 + \epsilon_A CA/CA_0} \quad (2)$

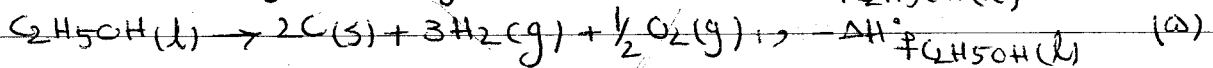
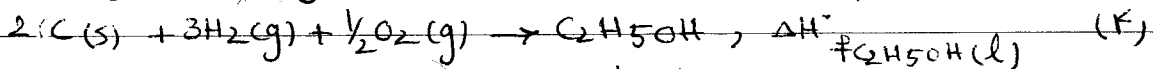
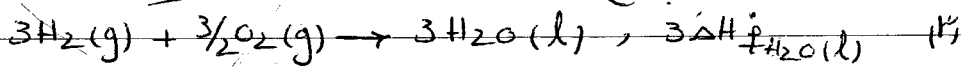
برای حل می توانیم اوج (هر دو هم درجه واکنش شدت میزند) فقط یکی از این دو را انتخاب کنیم و آن واکنش تشکیل آن محسوب است که واکنش سنتز کامل محسوب است.



میان CO از C خالص در O_2 خالص تشکیل شده پس واکنش سنتز کامل داریم و واکنش زیر، واکنش تشکیل CO نیست بلکه فقط یکی از می توانیم واکنش است که CO در آن شرکت می کند. هر دو هم فقط یک واکنش تشکیل دارد.



هر دو واکنش را در یک عدد ضرب کنیم که واکنش هم در همان عدد ضرب می شود و اگر عدد واکنش را با هم جمع کنیم که واکنش نیز مجموع اعدادهای واکنش بدست می آید.



واکنش های ۲، ۳ و ۴ هم در همان Δ واکنش است. $(1) \rightarrow (2) + (3) + (4)$

$$\Delta H^\circ_T = 2\Delta H^\circ_f(CO_2(g)) + 3\Delta H^\circ_f(H_2O(l)) - \Delta H^\circ_f(C_2H_5OH(l))$$

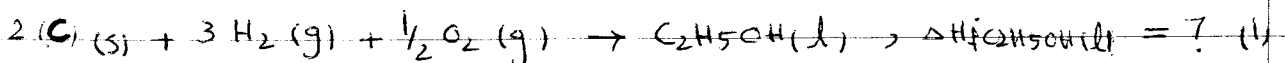


$$\Delta H^\circ = r\Delta H^\circ_{fR} + s\Delta H^\circ_{fS} + \dots - a\Delta H^\circ_{fA} - b\Delta H^\circ_{fB}$$

اگر از مجموع اعدادهای تشکیل محصولات یک واکنش مجموع اعدادهای تشکیل مواد اولیه همان واکنش را کم کنیم، که واکنش بدست می آید.

وکی اشتغال این را در حل این است که واکنش های تشکیل بدین ترتیب انجام می دهند و سنتز کامل اعداد بدین ترتیب.

حل این مشکل از طریق واکنش احتراق است چون احتراق همواره اعداد بدین است. مثلاً در واکنش تشکیل آب:



$$-r_A = \frac{-1}{V} \frac{dN_A}{dt} \xrightarrow{N_A = N_0(1-X_A)} -r_A = \frac{-1}{V} \times \frac{-N_A \cdot dX_A}{dt}$$

$$-r_A = \frac{N_A}{V} \frac{dX_A}{dt} \Rightarrow -r_A = \frac{N_A}{V \cdot (1 + \epsilon_A X_A)} \frac{dX_A}{dt}$$

$$-r_A = \frac{C_A \cdot dX_A}{(1 + \epsilon_A X_A) dt} \quad (3)$$

تحليل ریفرانتسی در حالت حجم متغیر که به مثابه تحلیل ریفرانتسی در حالت حجم ثابت است فقط شکل ریاضی آن متفاوت است

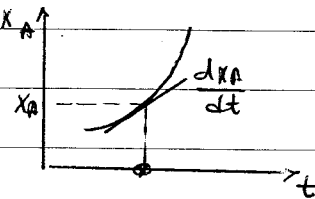
رابطه شتاب و واکنش: $-r_A = k C_A^n$ در حالت حجم ثابت و واکنش

در حالت حجم متغیر این معادله سرعت عموماً نمی شود فقط C_A ، $-r_A$ (3) آن متفاوت است (حالت کلی تغییر نمی کند)

$$\text{در حالت حجم متغیر: } \ln(-r_A) = \ln k + n \ln C_A$$

	(2)	
t	C_A	X_A
t_0	C_{A0}	
t_1	C_{A1}	
		$-r_A$

در حالت حجم ثابت C_A بر حسب t را رسم می کنیم و در آن زمان X_A بر حسب t را رسم می کنیم و اگر در هر زمانی C_A و $-r_A$ را از این دو رسم بگیریم



کنیم $\frac{dX_A}{dt}$ در آن زمان نسبت به آن $-r_A$ در آن لحظه نسبت
آنچه نسبت به $\frac{dX_A}{dt}$ و X_A و ϵ_A و C_A معلوم هستند

و حال با $\ln(-r_A)$ بر حسب $\ln C_A$ را رسم کنیم

تحلیل استرالی حجم به صورت استرالی فقط در تغییر ریاضی متفاوت است. (برواقع در استرالی $(1 + \epsilon_A X_A)$ هم (میانگین استرالی))

مثال ۳-۷: حل کنید

مثال ۳-۷: حل کنید (این مثال را بعد از آنکه واکنش درجه اول تابع تغییرات آنرا بیابید)
واکنش درجه اول: $A \xrightarrow[k]{\text{شماره واکنش}} R \Rightarrow \ln \frac{C_A}{C_{A0}} = -kt \quad -r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k C_A$

$$M \xrightarrow[\text{شماره واکنش}]{\text{شماره واکنش}} \text{محصول} \Rightarrow -r_M = -\frac{dM}{dt} = k M$$

$$\Rightarrow \ln \frac{M_0}{M} = kt$$

تعداد (مولات)

$$t = 2 \text{ hr}$$

$$M_0 = 180 \text{ \$}$$

$$M = 180 - 45 = 135 \text{ \$}$$

$$k = \ln \frac{180}{135} = k \times 2 \Rightarrow k = 0.1438 \text{ hr}^{-1}$$

$$\text{تعداد مولات: } \ln \frac{M_0}{M} = 0.1438 t$$

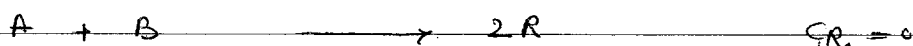
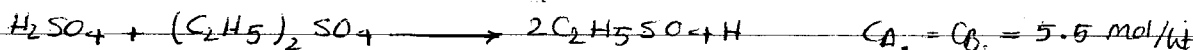
تعداد مولات در هر لحظه M ، t ، M_0 است پس در هر لحظه M است

$$t = 3 \text{ hr}, k = 0.1438 \text{ hr}^{-1}, M = 135 \text{ \$}, M_0 = ?$$

$$\ln \frac{M_0}{135} = 0.1438 \times 3 \Rightarrow M_0 = 207.82 \text{ \$}$$

$$\# 27.82 = 207.82 - 180 = \text{سود حاصل}$$

مثال ۲-۱. عدد ۳، ۱۳، ۳، ۱۳ (تعداد مولات در هر لحظه و تعداد مولات)



تعداد مولات در هر لحظه C_R است

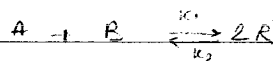
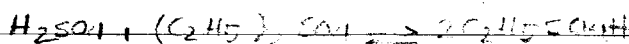
باز از اصل A، 2 مول R تولید می شود

تولید مولات در هر لحظه C_R است

تولید مولات در هر لحظه C_R است

تولید مولات در هر لحظه C_R است

تولید مولات در هر لحظه C_R است



$$r_A = k_1 C_A C_B - k_2 C_R^2$$

$$E = k_1 X_A C_A - (2X_A C_A - 1) X_A = 2k_1 \left(\frac{1}{X_A C_A} - 1 \right) C_A$$

$$X_A C_A = ? , C_A = \text{فصل اول و دوم}$$

$$C_A = C_A (1 - X_A) \Rightarrow C_R = A - C_R X_R$$

$$\frac{C_A X_R}{-1} = \frac{C_R X_R}{2} \Rightarrow C_R = C_A + 2 C_A X_A$$

$$X_R = \frac{N_R - N_R}{N_F} \Rightarrow X_A = \frac{N_A - N_A}{N_A}$$

t (min)	C _R (mol/lit)	X _A	E	K _{1,2}
1- 0	0	0	0	—
2- 41	1.18	0.107	0.022	5.37 × 10 ⁻⁴
3- 48	1.38	0.125	0.026	5.41 × 10 ⁻⁴
4- 55	1.63	0.148	0.032	5.31 × 10 ⁻⁴
5- 75	2.24	0.204	0.047	5.27 × 10 ⁻⁴
6- 96	2.75	0.25	0.063	6.56 × 10 ⁻⁴
7- 127	3.31	0.301	0.083	6.53 × 10 ⁻⁴
8- 146	3.76	0.342	0.102	6.99 × 10 ⁻⁴
9- 162	3.31	0.3016	0.105	6.48 × 10 ⁻⁴
10- 180	4.11	0.374	0.121	6.72 × 10 ⁻⁴
11- 194	4.31	0.392	0.134	6.9 × 10 ⁻⁴
12- 212	4.45	0.405	0.144	6.79 × 10 ⁻⁴
13- 264	4.86	0.442	0.18	6.71 × 10 ⁻⁴
14- 318	5.15	0.463	0.212	6.82 × 10 ⁻⁴
15- 368	5.32	0.481	0.244	6.77 × 10 ⁻⁴
16- 379	5.35	0.486	0.253	6.67 × 10 ⁻⁴
17- 410	5.42	0.492	0.272	6.63 × 10 ⁻⁴
18- ∞	5.80	0.527	∞	

تولید مولات در هر لحظه C_R است

$$\rightarrow X_A = \frac{C_A - C_{Ae}}{2C_A} = 1 - \frac{C_A}{C_A} \Rightarrow X_A = \frac{C_A}{2 \times 5.5} = \frac{C_A}{11}$$

از اصل هم چنین نتیجه می‌گیریم که:

$$X_A = 1 : \text{و البته با استفاده از اصل اول} \Rightarrow C_A = 11, X_{Ae} = \frac{C_{Ae}}{11} = 0.527$$

مسئله ۱۰

$$\rightarrow E = \frac{1}{9.873} \ln \frac{0.527 - 0.054}{0.527 - X_A} = k_1 t \Rightarrow E \text{ (درجه سانتیگراد)}$$

مسئله ۱۱: در یک سیستم واکنش دو مرحله‌ای، واکنش اول از نوع واکنش مرتبه اول و واکنش دوم از نوع واکنش مرتبه دوم است. در صورتی که در هر دو مرحله، واکنش‌ها در یک محلول انجام می‌دهند و در هر دو مرحله، واکنش‌ها در یک محلول انجام می‌دهند. در هر دو مرحله، واکنش‌ها در یک محلول انجام می‌دهند.

$$\Rightarrow k_1 = 6.5 \times 10^{-4} \text{ (lit/mol min)}$$

$$K_2 = \frac{k_1}{k_2} = \frac{C_{Ae}^2}{C_{Ae} C_{Be}} = \frac{5.8^2}{2.6 \times 2.6} = 4.98$$

$$C_{Ae} = C_A (1 - X_{Ae}) = 5.5 (1 - 0.527) = 2.6$$

$$K_2 = 1.31 \times 10^{-4} \text{ (lit/mol min)}$$

$$\Rightarrow -r_A = 6.5 \times 10^{-4} C_A C_B - 1.31 \times 10^{-4} C_A^2$$

مسئله ۱۲: در یک واکنش دو مرحله‌ای، واکنش اول از نوع واکنش مرتبه اول و واکنش دوم از نوع واکنش مرتبه دوم است. در صورتی که در هر دو مرحله، واکنش‌ها در یک محلول انجام می‌دهند و در هر دو مرحله، واکنش‌ها در یک محلول انجام می‌دهند.

$$r_B = r_A = r = 0.026 C_B \quad X$$

مسئله ۱۳: در یک واکنش دو مرحله‌ای، واکنش اول از نوع واکنش مرتبه اول و واکنش دوم از نوع واکنش مرتبه دوم است. در صورتی که در هر دو مرحله، واکنش‌ها در یک محلول انجام می‌دهند و در هر دو مرحله، واکنش‌ها در یک محلول انجام می‌دهند.

$$-r_A = \frac{C_A}{1 + E_A X_A} \times \frac{dX_A}{dt}$$

$$\frac{C_A}{C_A} = \frac{1 - X_A}{1 + E_A X_A} \Rightarrow X_A = \frac{1 - C_A/K_A}{1 + E_A C_A/K_A} = \frac{C_A - C_A}{C_A + E_A C_A}$$

$$dt = \frac{C_A \cdot dX_A}{(1 + E_A X_A)(-r_A)} \Rightarrow -r_A = \frac{K C_A^n}{(1 + E_A X_A)^n} = \frac{K C_A^n (1 - X_A)^n}{(1 + E_A X_A)^n}$$

$$dt = \frac{(1 + \epsilon_A X_A)^{n-1} dX_A}{K C_A^{n-1} (1 - X_A)^n} \Rightarrow kt C_A^{n-1} = \int_0^{X_A} \frac{(1 + \epsilon_A X_A)^{n-1} dX_A}{(1 - X_A)^n}$$

مثال 1 - اگر $n=1$ باشد

$$kt = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{1 - X_A} \Rightarrow -\ln(1 - X_A) = \ln\left(\frac{1}{1 - X_A}\right) = kt$$

این رابطه با ما می‌دهد - حجم ثابت است (سطل متغیر) و می‌تواند فرقی داشته باشد

$$V = V_0 (1 + \epsilon_A X_A) \Rightarrow V - V_0 = V_0 \epsilon_A X_A \Rightarrow X_A = \frac{V - V_0}{V_0 \epsilon_A}$$

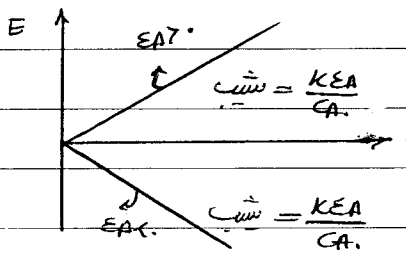
$$-\ln\left(1 - \frac{\Delta V}{V_0 \epsilon_A}\right) = kt, \Delta V = V - V_0$$

$V \sim X_A$ مربوط است، C_A هم X_A مربوط است

بین این دو متغیر X_A و V ارتباطی نیست

مثال 2 - اگر $n=0$ باشد

$$\int_0^{X_A} \frac{\epsilon_A dX_A}{1 + \epsilon_A X_A} = \frac{\epsilon_A kt}{C_A} \Rightarrow \ln(1 + \epsilon_A X_A) = \frac{\epsilon_A kt}{C_A}$$



مثال 3 - $2A \rightarrow 2R \quad | \quad A + B \rightarrow \text{شود}$

$$-r_A = K C_A^2 \quad C_A = C_B \quad (C_A = C_B \text{ و } -r_A = K C_A^2 \text{ و } C_A \text{ همواره } C_B = ?)$$

$$kt C_A = \int_0^{X_A} \frac{(1 + \epsilon_A X_A)^{\epsilon_A} dX_A}{(1 - X_A)^2}$$

سطل متغیر ϵ_A (متغیر) است

$$kt C_A = \int_0^{X_A} \frac{(1 + \epsilon_A)}{(1 - X_A)^2} dX_A - \epsilon_A \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1 - X_A)}$$

$$\text{حالت اول: } E = (1 + \epsilon_A) \left[\frac{1}{1 - X_A} \right]_0^{X_A} + \epsilon_A \ln(1 - X_A) = kt C_A$$

$$E = (1 + \epsilon_A) \left[\frac{X_A}{1 - X_A} \right] + \epsilon_A \ln(1 - X_A) = kt C_A \quad \text{حالت دوم} = X_A$$

مثال

$$\epsilon_A = 0 \Rightarrow E = (1 + \epsilon_A) \left[\frac{X_A}{1 - X_A} \right] = V$$

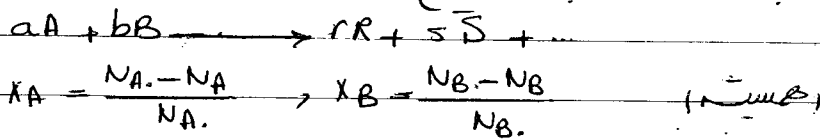
فصل چهارم =

تجمع + مصرف نسبت واکنش + محصول = ورودی
 این شکل کلی بیان است که هم برای مدیم و هم برای انرژی استفاده می شود و هم مدتی و هم
 شدتی (بکار می رود) و هم برای سیستم بسته (در لاکور batch) و هم برای سیستم باز (در التور و جری)
 و هم شکل استاندارد و هم شکل ریفرانس و معنی مواضع هم شکل نیمه ریفرانس و در مورد
 هم برای کل سازنده ها (مخلوط) و هم برای تک تک سازنده ها نوشته می شود زیرا انجام واکنش
 ناقص اصل بناء هم نسبت (در بیان نوشته شده در بالا، مصرف نسبت واکنش در واقع
 برای تک تک سازنده ها نوشته شده است و در کل مخلوط این عبارات را خواهم داشت)
 * باید دقت داشت با هم در التورهای اچهل که حاصل 2 ظاهر داریم قبل از انجام واکنش محیط
 انتقال هم را داریم و نسبت دیگر در این نوع التورها نحوه انتقال 2 ما را مختلف (عند قابل انتقال)
 با هم است.

حالت سبزه

دکاتی در رابطه با فصل 4 = مدیت تغییر می

1) ماورکی نمی توان گفت EA یا EB یا XA یا XB بلایر است
 به مصرف واکنش کلی زیر داریم (حیدر ظنگری و حیدر ظنگری):



در طایفه التورهای اچهل یا A و در التورهای اچهل یا B میگویند (B طایفه A است)
 وقتی می نویسیم "همیشه" یعنی این رابطه هر چه حالت باشد معتبر صالح است.

$$\Rightarrow X_A = 1 - \frac{N_A}{N_{A0}}, \quad X_B = 1 - \frac{N_B}{N_{B0}}$$

$$\Rightarrow N_A = N_{A0}(1 - X_A), \quad N_B = N_{B0}(1 - X_B)$$

$$\frac{-r_A}{a} = \frac{-r_B}{b} = \dots = \frac{r_R}{r} = \frac{r_S}{s} \quad (\text{همیشه})$$

$$\frac{dn_i}{v_i} = d\varepsilon \Rightarrow dn_i = v_i d\varepsilon \Rightarrow n_i - n_i^0 = v_i \varepsilon \Rightarrow \varepsilon = \frac{n_i - n_i^0}{v_i}$$

لرزه مشترک

$$\frac{dn_i}{v_i} = \frac{dn_j}{v_j} \Rightarrow \frac{N_A - N_{A0}}{-a} = \frac{N_B - N_{B0}}{-b} \quad (\text{همیشه})$$

$$\Rightarrow \frac{N_A}{a} - \frac{N_{A0}}{a} = \frac{N_B}{b} - \frac{N_{B0}}{b} \quad (\text{همیشه است و (1)})$$

باشد یا نباشد

معادله نسبت استوکیومتری باشد یعنی $\frac{N_A}{a} = \frac{N_B}{b}$ $\Rightarrow \frac{N_A}{a} = \frac{N_B}{b} \mid \frac{C_A}{a} = \frac{C_B}{b}$

اگر معادله نسبت استوکیومتری باشد معادله درجه و ضرایب به نسبت استوکیومتری آتی خواهد بود.

$$\frac{N_A}{N_B} = \frac{a}{b} \Rightarrow \frac{N_A}{N_B} = \frac{a}{b}$$

سین اگر $\frac{N_A}{N_B} = \frac{N_A}{N_B} \Rightarrow \frac{N_A}{N_A} = \frac{N_B}{N_B} \Rightarrow X_A = X_B$

سین اگر معادله نسبت استوکیومتری باشد X_A با X_B برابر می شود سین اندک لزوماً برابر نیستند مثلاً وقتی $X_A = 1$ باشد لزوماً X_B هم 1 باشد و برعکس.

2) رابطه مورد ϵ_A و ϵ_B :

$$\epsilon_A = \frac{V|_{X_A=1} - V|_{X_A=0}}{V|_{X_A=0}}, \quad \epsilon_B = \frac{V|_{X_B=1} - V|_{X_B=0}}{V|_{X_B=0}}$$

یا ϵ_A با ϵ_B با هم مساویند. الزاماً چیزی معین $V|_{X_A=1}$ لزوماً با $V|_{X_B=1}$ برابر نیستند مثلاً این معادله معادله نسبت استوکیومتری باشد ولی $V|_{X_A=0} = V|_{X_B=0}$ در هر نقطه X_A با X_B برابر نیستند مگر در نقطه اول.

$$V = V_0 (1 + \epsilon_A X_A); \quad V = V_0 (1 + \epsilon_B X_B)$$

در هر نقطه X_A و X_B داریم و یک V مشترک داریم سین :

$$\epsilon_A X_A = \epsilon_B X_B \quad (\text{همیشه})$$

اگر هم ثابت باشد : $\epsilon_A = \epsilon_B = 0 \Rightarrow 0 = 0 \quad \checkmark$

رابطه : $-r_A = \frac{C_A}{1 + \epsilon_A X_A} \frac{dX_A}{dt} = \frac{C_A \frac{dX_A}{dt}}{a(1 + \epsilon_A X_A)} = \frac{C_B \frac{dX_B}{dt}}{b(1 + \epsilon_B X_B)}$

$$\Rightarrow \frac{C_A dX_A}{a} = \frac{C_B dX_B}{b} \quad (\text{همیشه})$$

انتگرال $\frac{C_A X_A}{a} = \frac{C_B X_B}{b} \quad (\text{همیشه})$: رابطه بین X_A و X_B

در این جا هم سین استوکیومتری استوکیومتری باشد : $\frac{C_A}{a} = \frac{C_B}{b} \Rightarrow X_A = X_B$

$$\frac{CA \cdot X_A}{a} = \frac{CB \cdot \epsilon_A X_A}{b \epsilon_B} \Rightarrow \frac{CA}{a} = \frac{CB \cdot \epsilon_A}{b \epsilon_B}$$

$$\Rightarrow \frac{CA}{a \epsilon_A} = \frac{CB}{b \epsilon_B} \quad \text{یا} \quad \frac{a \epsilon_A}{CA} = \frac{b \epsilon_B}{CB} \quad (\text{همیشه})$$

در این جا به این نتیجه می‌رسیم اگر مواد نسبت استوکیومتری باشند $\frac{CA}{a} = \frac{CB}{b}$ پس $\epsilon_A = \epsilon_B$ مثال حل شود

فصل پنجم =

در این فصل ۲ نوع راکتور ایده‌آل را بررسی می‌کنیم.

نوع اول راکتور batch ایده‌آل :

راکتور batch یعنی سیستم بسته‌ای که واکنش در آن اتفاق می‌افتد که این سیستم بسته می‌تواند در حجم ثابت و یا در فشار ثابت (ظرف پلنر و سیلندر) کار کند.
(مانند مخزن صلب)

حرف در یک راکتور batch به دست آوردن X_A بر حسب زمان است : $X_A = X_A(t)$
در راکتور batch N_A تابع زمان است $N_A = N_A \cdot (1 - X_A)$

و این که روی هر لحظه‌ای هم مقدار محصول داریم و هم میزان حرارتی را به راکتور می‌دهیم تا مقدار محصول مطلوب را بدست آورده باشیم.
رایزر کار در این هدف بیان انرژی و حجم در این راکتور است.

تجمع + مصرف یا تولید به علت واکنش + خورجی = ورودی : بیان حجم
اگر تبدیل را بر حسب زمان بخوانیم باید از بیان حجم و اگر تبدیل را بر حسب زمان بخوانیم باید از بیان انرژی استفاده کنیم.

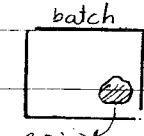
رابطه بالا بر روی راکتورهای batch در حرارتی (سیستم بسته و باز) برقرار است.

صفر = خورجی ، صفر = ورودی : و اما در مورد راکتور batch

میزان X_A بر حسب زمان را می‌خوانیم رابطه را باید مشتق بشود نسبت به زمان :

$$A \frac{dN_A}{dt} = \text{شماره جمع سازنده در لحظه } t$$

برای بدست آوردن مصرف به علت واکنش (در کل batch در حرارتی) باید یک جزو حجم در راکتور
در نظر بگیریم : $-r_A dV_{batch} = \text{مصرف به علت واکنش در لحظه } t \text{ (در هر حجم)}$



سین برای کل، التور باید از آن استرال بگیریم (در طول حجم کنترل):

$$\int_{c.v.} -r_A dv_{c.v.}$$

این استرال کسری افعال پذیر نیست. مگر این که r_A مستقل از طول باشد یعنی سیستم نسبت باشد

مانند: $M = \rho V$ $M = \frac{V}{V}$

حداکثر التور فقط به نظر و یا با غلظت متفاوت باشد یعنی توان استرال گرفت پس به همین منظور است که کلمه ایده آل برای batch استفاده می شود. یعنی چیزی داریم که آنقدر خوب هم میزنند که تمام خواص در نقاط مختلف یکسان است.

$$\Rightarrow \int_{c.v.} -r_A dv_{c.v.} = -r_A \cdot V_{c.v.} = -r_A \cdot V$$

بخطای حجم ثابت (با توجه به حجم متغیر)

$$\text{بازرسی} \rightarrow 0 = 0 + (-r_A)V + \frac{dN_A}{dt} \rightarrow -r_A = -\frac{1}{V} \frac{dN_A}{dt}$$

سین به همان خاطر تفاوت نسبت رسیدیم یعنی رابطه مورد نظر برای x_A در التور batch فقط فقط باید تابع نسبت باشد یعنی سرعت واکنش است که متنوع می شود و در هر لحظه هم میزان تبدیل تغییر می کند.

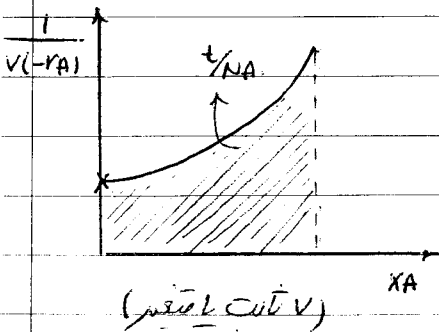
$$N_A = V_{A_0} (1 - x_A)$$

و حال رابطه x_A و N_A

$$-r_A = -\frac{1}{V} (-N_{A_0}) \frac{dx_A}{dt} \Rightarrow -r_A = \frac{N_{A_0}}{V} \frac{dx_A}{dt}$$

$$\Rightarrow dt = \frac{N_{A_0} dx_A}{V (-r_A)} \Rightarrow t = N_{A_0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{V (-r_A)}$$

که در این معادله تابع تبدیل $-r_A$ داشته باشیم که به انواع نسبت ها (در حالت کلی) در دسترس است.



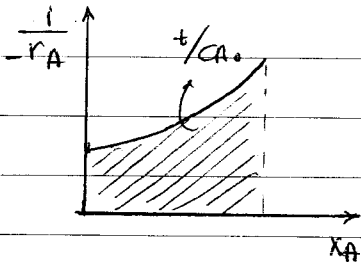
سازماندهای حالت آلفا این است که V ثابت باشد. حدی این استرال بالک التور و یا غیر نسبت و طی نقطه x لزوماً در آن حالت نیست. سین اگر خواهم تبدیل مورد نظر برسیم باید سطح زیر استرال $\frac{t}{N_{A_0}}$ شود.

حالت خاص ثابت :

جرم در حضور فنریک آنجی، در اکثر حلال حجم نقص نمی شود
 حجم نقص ثابت در اکثر batch حجم ثابت و حجم ثابت

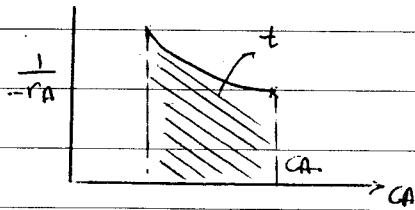
$$v = dt \Rightarrow t = CA \int_0^{XA} \frac{dXA}{-r_A}$$

مثلاً : $-r_A = k CA = k CA (1 - XA) \Rightarrow$ مانداری در بالا



این نمودار هندسی معادله بالاست و بصورت
 عددی معادله را حل می کنیم و با یونیک رسم
 در پایان محاسبه آن را حل می کنیم.

$$CA = CA_0 (1 - XA) \Rightarrow dCA = -CA_0 dXA \Rightarrow t = \int_{CA}^{CA_0} \frac{dCA}{-r_A}$$



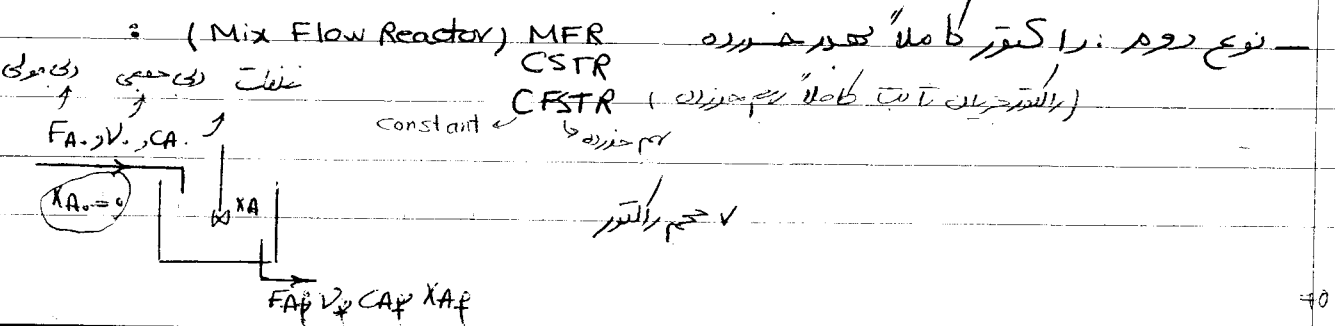
در شرطی که دیده شده فرض شده که $-r_A$ تابع
 صعودی باشد (در یک تابع $-r_A$ بر حسب CA
 صعودی باشد، $-r_A$ بر حسب XA هم صعودی
 می شود چون CA با XA رابطه عکس دارد)

در $\frac{1}{-r_A}$ بر حسب CA نزولی است
 v با تبدیل لزوماً بصورت خطی تغییر نمی کند و در درجه اول ثابت

حالت خاص متغیر :

$$V = V_0 (1 + \epsilon_A XA)$$

$$t = \frac{NA_0}{V_0} \int_0^{XA} \frac{dXA}{(1 + \epsilon_A XA)(-r_A)}, \quad -r_A = k CA^n, \quad CA = \frac{CA_0 (1 - XA)}{1 + \epsilon_A XA}$$



1 stone = 1416m

در این جا هم V یا فنل X_A است و در این است که X_A فقط از نسبت بر است نمی آید بلکه حجم و التور و در این جا هم حجم است.
 * هر طره، التور داشته هم batch و هر جایی بلا ضابطه بیان حجم (مجموع مسائل) می شود

شدت تجمع + شدت صفا + شدت خروجی = شدت ورودی
 هندسی معکوس، مثلاً فرض کنیم این مخزن چیزی دارد که التور خوب هم میزند که در نقاط مختلف، اگر این محلول نداریم پس محلول خروجی، همان محلول داخل است.
 1- در هر نقطه در تمام نقاط هم التور محلول یکسان است.
 2- در همان لحظه، محلول خروجی با محلول داخل یکی است.

افزون بالا محلول در تمام نقاط هم التور

$$F_A = F_{A_0} - F_A \cdot X_A$$

حجم بیرون = حجم التور
 حجم التور

$$F_A = F_{A_0} (1 - X_A) + (-r_A)V + 0$$

S.S.S.F

فرض Mix flow است که حالت اشکالی بیان بالا قابل عمل است مثلاً $r_A dv = r_A v$

$$F_A \cdot X_A = (-r_A)V \Rightarrow \frac{V}{F_A} = \frac{X_A}{-r_A}$$

سپس X_A تابع نسبت $(-r_A)$ و حجم و در این رابطه معادله می گذاریم و التور می گویند
 که X_A اگر r_A است همان X_A در صورت کسر است چرا که در داخل صدمه بدلی داشته باشیم
 در خارج هم همان X_A را داریم پس علامت را با + نشان می دهیم
 از این 4 یا کمتر 3 تا بیش معلوم است $(-r_A)$ از نسبت معلوم است
 در صورت معمولاً بتوانیم قدم اول نسبت را بر است آورده F_{A_0} هم معلوم است (از نسبت)
 X_A هم نسبت می دهد و V با طراحی می کنیم

حالت چهارم

سریک یکم فصل سوم : 23 قدم - 26 قدم - 27 قدم

وصل یکم : 3 قدم (21 صله) - 14 قدم (27 صله)

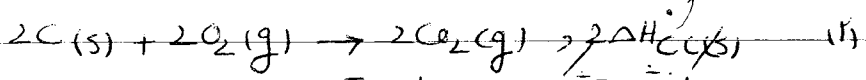
رکبیبی $F_{A_0} = V_0 C_{A_0}$ غلبت در $V = \frac{V}{F_{A_0}} = \frac{V}{V_0 C_{A_0}}$

رکبیبی است که بعد از زمان گذر از زمان فضایی چین 1555F است $\tau = \frac{V}{V_0}$ زمان پر شدن = τ

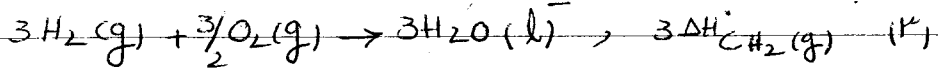
حالت تقریب است و در بعضی حالات معنی فیدلی دارد و بعضی حالات هم در نظر

combustion

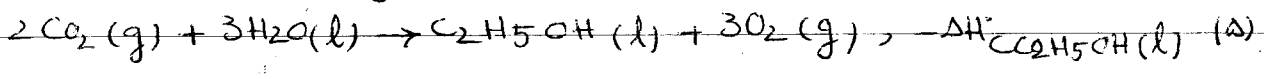
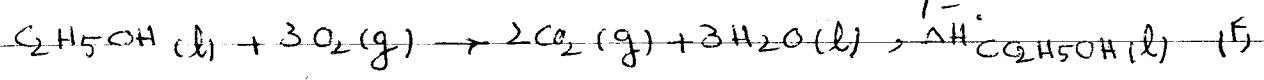
استوکیومتری مواد اولیه در ابرم



کرمی بنیمم و آنتالپی احتراق ابرم همان و آنتالپی تشکیل CO_2 است.



کل حاصله را می سوزانیم :



$$(1) + (2) + (4) \rightarrow (3)$$

$$\Delta H_{C_2H_5OH}^\circ = 2\Delta H_{CO_2}^\circ + 3\Delta H_{H_2O}^\circ - \Delta H_{C_2H_5OH}^\circ$$

نگران مجموع کوفه های احتراق عناصر سازنده یک جسم آلی است و آنتالپی احتراق مولی آن جسم را می نامیم
آنتالپی تشکیل آن جسم خواصش است

(مانند ۲-۳ اسید ترور)

در اینجا خود آنتالپی احتراق از طریق یک کالریمتری به دست می آید. یک کالریمتری مخزنی صلب است

$$Q_v = \Delta U$$

آنتالپی و آنتالپی را نمی دهیم بلکه با ما می دهد

در سیستم اول صلب که حجم ثابت است با انتقال لول در مخزن صلب سیستم به ابرم

$$1) W = 0 \Rightarrow Q_v = \Delta U$$

$$2) \Delta H = \Delta U + \Delta(PV)$$

$\Delta(PV)$ افتحالی مثال $\Delta(PV)$ گازها در نظر گرفت چون تغییر حجم صلبی که می سوزانیم در

مثال حجم یک کالریمتری صلب ناچیز است.

$$\Rightarrow \Delta H = \Delta U + \Delta(PV) = \Delta U + RT\Delta n$$

Δn حجم تغییر مول است که می سوزانیم

$$\Delta H = \Delta U + RT\Delta n$$

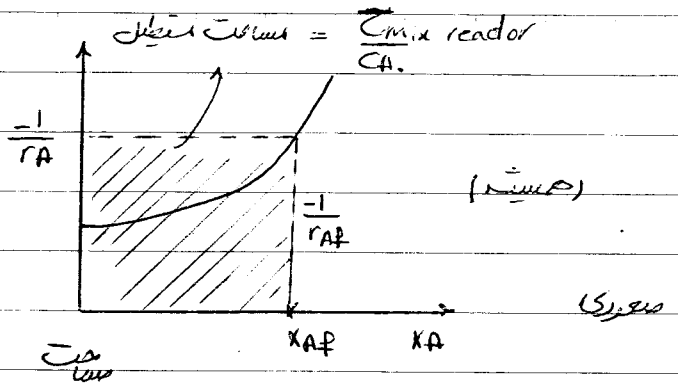
مثلاً در احتراق آلکل : $\Delta n = +1$

در سیستم دوم که صلب است : ΔU همان ΔU حالت قبل است اینجا حالت اول

سوزانیم ΔU آنجاست و $Q = \Delta H$

$$\Rightarrow \frac{V}{F_{A_0}} = \frac{V}{V_0 \cdot C_{A_0}} = \frac{\tau}{C_{A_0}}$$

$$\xrightarrow{\text{MFR (همیشه)}} \frac{V}{F_{A_0}} = \frac{\tau_m}{C_{A_0}} = \frac{X_{AF}}{-r_{AF}}$$



سین طبق رابطه مبرک $\frac{\tau}{C_{A_0}}$ از نظر هندسی τ مستطیل نشان داده شده می شود.

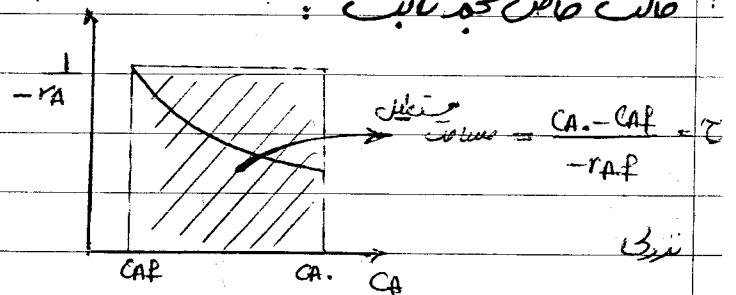
$$\tau = ? \rightarrow \tau = ? \rightarrow V = ?$$

ای بررسی شد طراحی راکتور Mix بود (سطح مستطیل اندازه راکتور را میدهد)

حالت خاص حجم ثابت :

$$\tau = \frac{C_{A_0} \cdot X_{AF}}{-r_{AF}}$$

$$\tau = \frac{C_{A_0} - C_{AF}}{-r_{AF}}$$



حالت حجم متغیر ولی در فشار ثابت و دمای ثابت :

$$\frac{\tau_m}{C_{A_0}} = \frac{1 - \frac{C_{AF}}{C_{A_0}}}{(1 + \epsilon_A \frac{C_{AF}}{C_{A_0}}) (-r_{AF})} = \frac{C_{A_0} - C_{AF}}{(C_{A_0} + \epsilon_A C_{AF}) (-r_{AF})}$$

نوع سوم - راکتور جریان پیوسته (حالت ایده آل برای راکتورهای لوله ای) :

MFR یک حالت ایده آل برای راکتورهای جریان است.

حالت ایده آل که برای یک لوله ای توان فرض کرد تا محاسبات راحت تر شوند این است که پروفایل سرعت یک خط مستقیم باشد (جریان مانند یک سیل حرکت کند)

(مثلاً در حالت آرام که یک حالت ایده آل است ولی

پروفایل سرعت سهموی است.) پس این راکتور

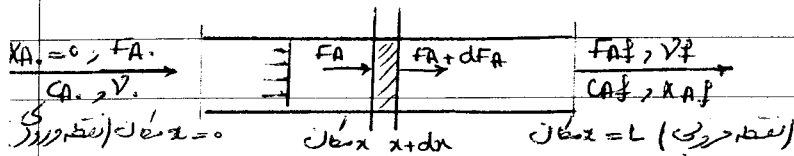
راکتور پیوسته یا راکتور قلابی (Plug Flow Reactor)



نامیده می شود. این حالت ایده آل است چون در مرکز سرعت Max و در دیواره ها صفر است و بی هیچ آنتیگرافی نیست با شد پروفایل سرعت به سطح خیلی نزدیک است.

حال می خواهیم آنرا اندازه معلوم باشد، تبدیل در خروجی یا اگر تبدیل معلوم باشد، اندازه را درست آوریم. بدیهی است که رویا باشد نسبت و روی حدار اینها را داریم. اینها را به بیان حجم است. روی در عمل نمی توان بیان را بصورت استواری نوشت چون نقطه نقطه تبدیل تغییر کند. پس استرال را به ریند استواری می نویسیم چون در جهت ششای تبدیل نداریم (در جهت ششای بزرگ است در جهت محور کوئیک (محال))

$$A \rightarrow R \text{ (طی)}$$



$$dv = s dx$$

جمع + مصرف + ششای خروجی = ششای ورودی
 بیان حجم برای A
 (ششای و برای مصرف)

$$FA = FA + dFA + (-r_A)dv + 0 \text{ (SSSF)}$$

این حالت مانند batch است بیان تفاوت که بیان ما تبدیل تابع زمان است. اگر استرال بود $-r_A$ تابع زمان (ششای) می شد و کار مشکل می شد.

$$-dFA = (-r_A)dv$$

$$FA = FA \cdot (1 - X_A)$$

$$\Rightarrow FA \cdot dX_A = (-r_A)dv$$

$$\frac{dv}{FA} = \frac{dX_A}{(-r_A)}$$

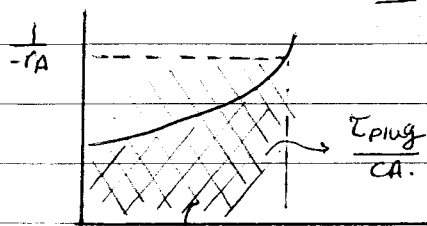
معادله استرال PFR برای این است dv

$$\frac{V}{FA} = \tau = \int_0^{X_{AF}} \frac{dX_A}{(-r_A)}$$

برای معلوم شدن این استرال باید تابع $(-r_A)$ داشته باشیم.

معمولاً وقتی $plug$ داریم، یعنی MFR با فرض تابع r_A می شود.

درجه واکنش مثبت: $\frac{-1}{r_A}$ بر حسب X_A معرور



نتیجه اگر تابع تغییرات $\frac{-1}{r_A}$ بر حسب X_A معرور

باشد و این صورت $plug$ و تبدیل است چون اندازه

کوئیک می شود و اگر اندازه ششای باشد $plug$

تبدیل نسبتی معرور و اگر MFR باشد از نظر فکر اندازه MFR و تبدیل (حیثی)

تعریف کلی از Plug Flow: زمانی است که زمان اقامت در راکتور ثابت باشد (زمان اقامت یکسان)

جریان های Mixed و Plug مختص راکتور نیستند.

سین پیرومیل سرعت یکسان است و طول لوله هم یکسان است در واقع شرط بالا را برقرار کرده ایم. در جهت شیب تبدیل یکسانی کند.

اصولاً راکتور جریانی تابع 2 میز است: 1 سینتیک - 2 نوع جریان (مدل جریان)

و اما در راکتور batch که جریان متناهم سین تابع سینتیک می شود

[مدل جریان متناهم سین میز است: 1 توزیع زمان اقامت RTD و 2 میز دیگر]

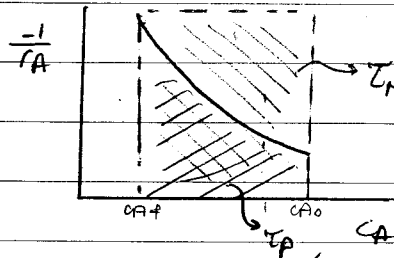
تفاوت یک حالت خاص PFR چیست؟

یک حالت خاص PFR، MFR است. اگر r_A با در صدی ثابت XAP ثابت فرض کرد (مانند حالت رجم اول) این حالت خاص را خواصم دانست. مثلاً می توان حسد را بر اساس مدل Plug Flow کرد و در نهایت گفت راکتور راکتور یک صورت داریم

$$PFR: \frac{V_P}{F_A} = \frac{\tau}{C_A} = \int_{X_{AF}} \frac{dX_A}{-r_A} \quad (\text{همیشه}) \quad \Rightarrow \quad \tau_P = \int_{X_{AF}} \frac{C_A \cdot dX_A}{-r_A}$$

$$\tau = \int_{C_{AF}}^{C_A} \frac{C_A \cdot dC_A}{-r_A}$$

$\xrightarrow{\text{حجم ثابت}}$
 $C_A \cdot dX_A = -dC_A$



راکتور جابجی از نظر اندازه راکتور Plug بهتر است

$$t_B = \int_{C_{AF}}^{C_A} \frac{dC_A}{-r_A} \quad \text{: رنج در حالت حجم ثابت}$$

$$\tau_P = t_B \quad \text{: سین در این حالت } v = Ct$$

سین حدیقه از راکتور Plug مانند یک لحظه است در راکتور batch چون هر دو اینها اند (همه طول برابر batch در حال رسیدن لحظه اند حین خروج هم می خوردند)

نکته 1: گفتیم چو لا در لحظه ای که در راکتور batch برای سینتیک استفاده می کنیم ولی در حالت آژون سینتیک متغیر راکتورهای batch نیست و مخصوص اگر سرعت واکنش زیاد باشد باید از راکتورهای جریانی استفاده کرد حین خطای batch زیاد است (سرعت در گونه گیری و ... کم است) در صورتی که بار شدن حالت SSSF عموماً گری می کند

در بعد دوباره در حالت SSSF (ریاکتور مخلوط کننده) حل شود.

سوال: چگونه برای بدست آوردن نسبت آب و الکل از راکتور Mix استفاده کنیم؟

$$MFR \rightarrow \frac{V}{FA} = \frac{\tau}{CA} = \frac{XA}{-r_A} = \frac{XACA}{\tau} = -r_A \quad (*)$$

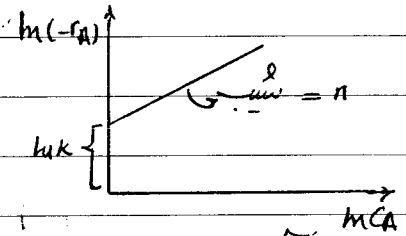
همیشه مشتق است (V) و در این (که این) قابل تغییر است (یعنی از تغییر در راکتور یا تغییر در پارامترهای دیگر).
 حالت SSSF برسد و بعد از این همان عملیات مخلوط کننده می کنیم.

$$\tau = \frac{V}{CA}$$

V	XAF	-rAF	CAF
⋮	⋮	⋮	⋮

$$-r_A = kCA^n$$

$$\ln(-r_A) = \ln k + n \ln CA$$



$(\frac{1}{r_A} = XA)$: منحنی

بدست آوردن نسبت از روی نمودار راکتور Mix در حکم چیست؟ و چه τ حجم محلول در راکتور است؟

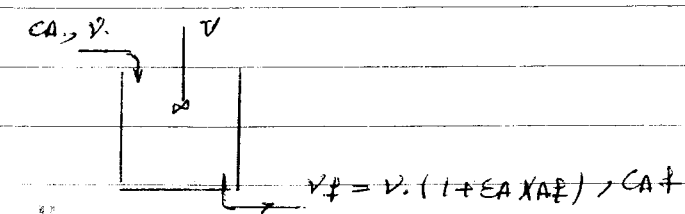
batch راکتور

سوال: آیا می توان از PFR برای بدست آوردن نسبت استفاده کرد؟

در این جا هم می توانیم قیاس کنیم و نسبت تبدیل را خروجی را بدست می آوریم.

$$PFR: \frac{V}{FA} = \frac{\tau}{CA_0} = \int_0^{XA} \frac{dXA}{-r_A}$$

با تغییر V ، τ و CA_0 تغییر می کند و یک نقطه نسبت می آید. پس با تغییر V و CA_0 نسبت بدست می آید. $\frac{\tau}{CA_0}$ بر حسب آنکه در محلول شود یا است. τ بدست آوردن نسبت از طریق راکتور Plug و مقدار تبدیل آنکه نسبت راکتور batch.



نکته: اگر MFR را استفاده کنیم

$$\tau = \frac{V}{v_0}$$

در اکثر موارد جریان در کانال متوسط اوقات لازم برای عبور از کانال (Holding Time) به معنای زمانی که طولی در اکثر اوقات دارند

min Residence Time

زمان متوسط اوقات: $\bar{t} = \frac{V}{v_p}$

چون در MFR تا همگراوار در می شوند، شرایط خروجی در مخرج سیال step function دارند.

اگر $\epsilon = 0 \Rightarrow \tau = \bar{t}$

چون \bar{t} مفروضه در این مورد هم برابر می شود.

در اکثر plug:

$$\tau = \frac{V}{v_0}$$

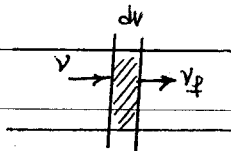
v_0 PFR v_p

$$\bar{t} \neq \frac{V}{v_p}$$

چون \bar{t} بتدریج عمیق می شود و این نسبت در بین

$\frac{V}{v_p}$ و $\frac{V}{v_0}$ خواهد بود و مقدار دقیق هم قابل محاسب است.

مقدار دقیق \bar{t} :



$v_0 < v < v_p$ و $v_0 \neq v_p$
فردا در این حالت تقسیم می کنند

$$dv = v dt$$

لازم می آید که در تمام طول کانال این برقرار باشد

plug $\rightarrow dv = v dt$

تد است

$$d\bar{t} = \frac{dv}{v} \rightarrow d\bar{t} = \frac{F_A \cdot dX_A}{-r_A} \times \frac{1}{v \cdot (1 + \epsilon X_A)}$$

انتگرال $\bar{t} = \int_0^{X_{AF}} \frac{F_A \cdot dX_A}{v \cdot (1 + \epsilon X_A) \cdot (-r_A)}$ $\frac{F_A}{v} = C_A \rightarrow \bar{t} = C_A \cdot \int_0^{X_{AF}} \frac{dX_A}{(1 + \epsilon X_A) \cdot (-r_A)}$

در مقدار دقیق \bar{t} هم ϵ است که در صورتی که در صورتی که \bar{t} بین $\frac{V}{v_p}$ و $\frac{V}{v_0}$ است.

مسئله یا ترجم

فصل ششم :

A → R

مسئله : واکنش درجه n زیر بار و نظر کنید

-rA = kCAⁿ

$$MFR \Rightarrow \frac{v_M}{F_A} = \frac{z_M}{C_A} = \frac{X_A F}{-r_A} = \frac{X_A F}{k C_A^n (1 - X_A F)^n}$$

$$k z_M C_A^{n-1} = \frac{(1 + \epsilon_A X_A)^n X_A}{(1 - X_A)^n} \quad (1)$$

$$Plug \Rightarrow k z_P C_A^{n-1} = \int_0^{X_A} \frac{(1 + \epsilon_A X_A)^n dX_A}{(1 - X_A)^n} \quad (2)$$

$$(1) \div (2) \Rightarrow E = \frac{k z_M C_A^{n-1}}{k z_P C_A^{n-1}} = \frac{(1 + \epsilon_A X_A)^n X_A}{\int_0^{X_A} \frac{(1 + \epsilon_A X_A)^n dX_A}{(1 - X_A)^n}}$$

XA در صورت دفع کسر یک است و همان XAF می باشد.
مثال های حل شده فصل یکم و ششم حتماً حل شوند (مثال آخر با هم است).

$$\epsilon_A = 0 \quad \tau = \frac{v_M}{v_P} \quad E = \frac{X_A}{\int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1 - X_A)^n}}$$

حل باید به n مقایسه کنیم (در دو حالتین کنیم) :

$$n = 0 \Rightarrow E = \frac{X_A}{\int_0^{X_A} dX_A} = 1 \quad (\epsilon_A = 0, \epsilon_A \neq 0)$$

ملاحظه Mix و Plug برای واکنش درجه صفر و یک در مثال است حتی اگر $\epsilon_A \neq 0$ باشد.
این نتیجه می آید (وقتی $n = 0$ باشد دیگر -rA تابع خطی و تبدیل نخواهد بود و یک حالت هستند)

ملاحظه Mix در یک حالت یا شش تری است با اول حالت CA است و با اول CAP می شود.
ملاحظه Plug بتدریج CAP می رسد (بتدریج حالت یک می شود) و این عامل مرتباً Plug نسبت به Mix است.

$$n=1 \Rightarrow E = \frac{X_A}{(1-X_A) \ln(1-X_A)}$$

در این جا E تابع XA است و صرفاً XA سبب باشد وضعیت Mix نسبت به Plug یعنی E تابع ثابتی نیست.

مثال - $X_A = 0.99 \Rightarrow E = 21.5$

یعنی برای داشتن درجه اول اگر خواهم تبدیل 0.99 برسم هم رکتور Mix متوسط 21.5 برابر هم رکتور Plug متوسط می شود.

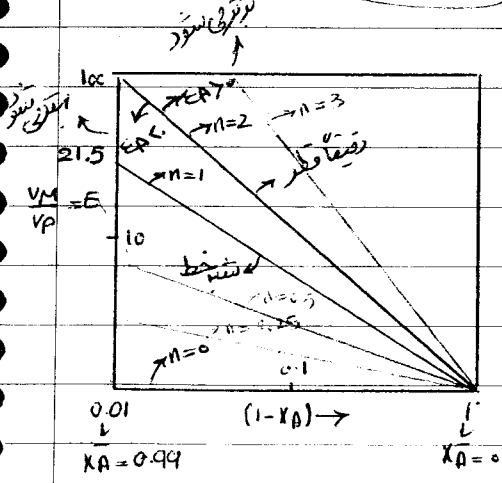
$$n \neq 1 \Rightarrow E = \frac{V_M}{V_P} = \frac{X_A}{(1-X_A)^n} \cdot \frac{1}{\frac{1}{n-1} [(1-X_A)^{-n+1}] X_A}$$

$$E = \frac{V_M}{V_P} = \frac{X_A / (1-X_A)^n}{\frac{1}{n-1} \left[\frac{1}{(1-X_A)^{n-1}} - 1 \right]}$$

حالت خاص $n=2 \Rightarrow E = \frac{X_A / (1-X_A)^2}{X_A / (1-X_A)} = \frac{1}{(1-X_A)}$

مثال - $X_A = 0.99 \Rightarrow E = 100$

یعنی هم رکتور Mix ای که برای داشتن درجه دوم حالت تبدیل 0.99 برساند 100 برابر رکتور Plug متوسط است و اگر درجه 3 شود هم Mix سبب می شود پس درجه هم درجه اول و داشتن سبب باشد (درجه سبب) و نوع Mix یعنی وضعیت Mix از آن می شود.



این منحنی کاربردی است $\log \log$ و \log و باسد و نیز رکتور منحنی است هم این است که بین 0.01 و 1 و 0.1 شده است و نشان رکتور (روانش درجه 2 :

تصفا قطر است $\log E = -\log(1-X_A)$

بالا منحنی درجه خط بالای $n=2$ می افتد

* وضعیت که طرف ای کام می شود ($X_A = 0$) حین رکتور Plug معلوم می شود *

Mix

داشته ایم $\bar{V} = \frac{V}{V_0}$ و حال اگر قیمت باشد V_p نسبتی شود در نتیجه زمان t کم می شود V_p یعنی دانستیم کمتر اتفاق می افتد پس وضع را تور Mix بزرگی شود

مسئله ۲ = مسئله به هم بستن را تورها

$$\text{PER بریم} \Rightarrow \frac{dV}{F_{A_0}} = \frac{dX_A}{-r_A}$$

قبل از انجام می داریم $\frac{V}{F_{A_0}} = \int_{X_{A=0}}^{X_{A=p}} \frac{dX_A}{-r_A}$

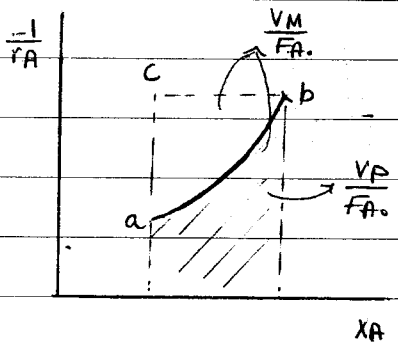
حال سوال این است که تبدیل ورودی یک را تور Plug میزنیم \bar{V} (خبر خوبی می تواند) خروجی یک Plug را ورودی را تور Plug دیگر قرار داد پس معادله PER بدین صورت تغییر می کند:

$$X_{A1} \neq 0 \Rightarrow \frac{V_p}{F_{A_0}} = \int_{X_{A1}}^{X_{A2}} \frac{dX_A}{-r_A}$$

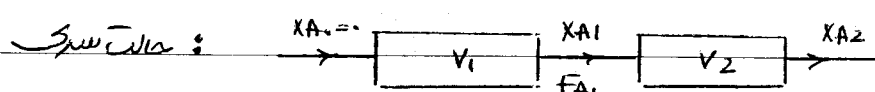
نقطه میانی استرال عوض می شود

$$\frac{V_M}{F_{A_0}} = \frac{X_{A2} - X_{A1}}{-r_A}$$

Mixed حالت حاصل Plug است :



abc سه ضلعی است که وضعیت Mixed است
 نسبت به Plug سوال می دهد
 هر چه ریف دانستیم به ازای X_{A2} یعنی نقطه
 a این تبدیل قرار می گیرد و وضع Mixed برتر
 می شود و اگر ریف دانستیم ضلعی باشد a بالاتر
 قرار می گیرد.

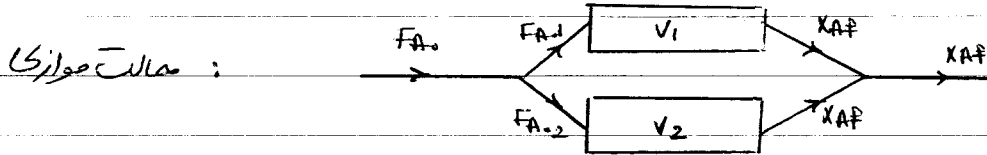


$$\frac{V_1}{F_{A_0}} = \int_0^{X_{A1}} \frac{dX_A}{-r_A}$$

$$\frac{V_2}{F_{A_0}} = \int_{X_{A1}}^{X_{A2}} \frac{dX_A}{-r_A}$$

$$\Rightarrow \frac{V_1 + V_2}{F_{A_0}} = \int_0^{X_{A2}} \frac{dX_A}{-r_A}$$

سین در این سیستم رسیدیم اگر چند راکتور بلاک و با سری کنیم عملکردشان با یک راکتور با مجموع اجماع تفاوتی نخواهد کرد (رواقت سوئی ندره ام)



حولات را این V_1, V_2 باید بگویم ای تنظیم کنیم که به تبدیل یکسان برسند

$$\frac{V_1}{FA_{0.1}} = \frac{V_2}{FA_{0.2}} \quad \text{یا} \quad \frac{FA_{0.1}}{FA_{0.2}} = \frac{V_1}{V_2} \quad \leftarrow \quad \begin{aligned} V_1/FA_{0.1} &= \int_{X_{AF}}^{X_{AR}} \frac{dXA}{-r_A} \\ V_2/FA_{0.2} &= \int_{X_{AF}}^{X_{AR}} \frac{dXA}{-r_A} \end{aligned}$$

یعنی حولات به نسبت حجم ها تقسیم شود (حالت موازی و اتصال)

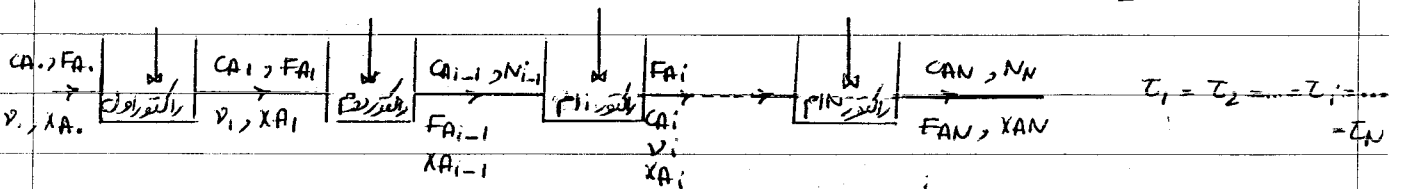
$$\Rightarrow \frac{V_1}{FA_{0.1}} = \frac{V_2}{FA_{0.2}} = \frac{V_1 + V_2}{FA_{0.1} + FA_{0.2}} = \frac{V_1 + V_2}{FA_0}$$

در این جا هم به این سیستم رسیدیم که هم سین موازی چند راکتور بلاک با یک راکتور با مجموع اجماع تفاوتی نخواهد کرد.

سین عملکرد یک سری راکتورهای بلاک سری با موازی نسبت شده برابر است با عملکرد یک راکتور بلاک با مجموع آن اجماع X_{AF} یکسان برده باشند

مسئله ۳ : مسئله هم سین راکتورهای هم حوزده (Mixed)
 بنا بر این میگردیم که راکتورها هم اندازه باشند $EA = 0$

حالت سری :



در یک راکتور PFR :

$$\tau_P = \int_{X_{AF}}^{X_{AR}} \frac{dXA}{-r_A}$$

حجم ثابت

$$\tau_P = \int_{CA_{AF}}^{CA_i} \frac{dCA}{-r_A}$$

در حالت سری $CA_i > CA_{AF}$

اگر

$$\tau_M = \frac{CA_i - CA_{AF}}{-r_{AF}}$$

والنسبة $\frac{CA_0}{CA_1}$

حالت حجم محصول ثابت است $\frac{plug}{\text{والتوزيع يثبت}}$

$$\tau_p = \int_{CA_1}^{CA_0} \frac{dCA}{kCA} = \tau_p = \frac{1}{k} \ln \frac{CA_0}{CA_1}$$

حلول این رابطه را برای مجموع التورها مطابق زیریم :
 هدف مقایسه N التور Mix است با یک التور بزرگ. پس با نوشتن معادله عملکرد سیستم برای التور نام :

MIX MFR در التور نام :
$$\tau_i = \frac{CA_{i-1} - CA_i}{kCA_i}$$

روش بدین گونه است که ابتدا حجم یک التور Mix را در نظر بگیریم. پس در N ضرب کرده تا N التور Mix درست آید بعد آن τ_N را با τ_1 یک التور بزرگ مقایسه کنیم.

$$\Rightarrow k\tau_i CA_i = CA_{i-1} - CA_i$$

$$k\tau_i = \frac{CA_{i-1} - CA_i}{CA_i}$$

$$\frac{CA_{i-1}}{CA_i} = k\tau_i + 1$$

این مقایسه به صورت انجام می شود :

یک این دو قسم حاصل تبدیل یکسان مقایسه کنیم (حجم التور Mix را با حجم التور نام
 تبدیل یکسان مقایسه کنیم. (مقدار 1-6)
 دیگر این که مقایسه تبدیلات در حجم یکسان
 است معادلات این دو مقایسه یکسان است.

برای التور اول :
$$\frac{CA_0}{CA_1} = 1 + k\tau_1$$

برای التور دوم :
$$\frac{CA_1}{CA_2} = 1 + k\tau_2 \quad \times \rightarrow \frac{CA_0}{CA_2} = (1 + k\tau_2)^2$$

التور N ام :
$$\frac{CA_{N-1}}{CA_N} = 1 + k\tau_N$$

روش N ام در رابطه

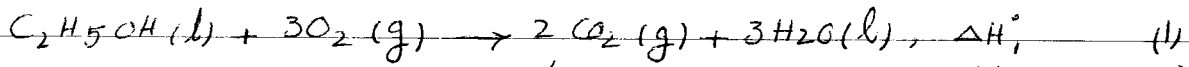
$$1 + k\tau_i = \left(\frac{CA_0}{CA_N} \right)^{\frac{1}{N}}$$

$$k\tau_i = \left(\frac{CA_0}{CA_N} \right)^{\frac{1}{N}} - 1$$

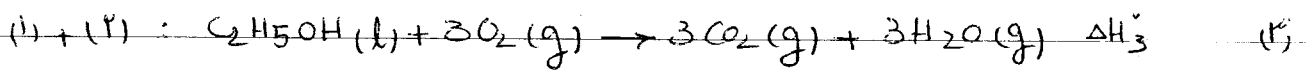
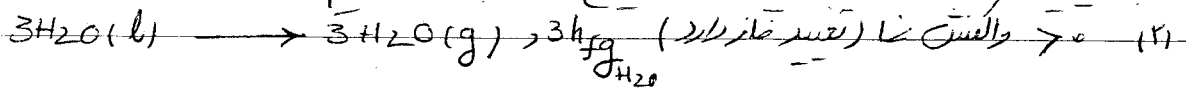
$$\tau_i = \frac{1}{k} \left[\left(\frac{CA_0}{CA_N} \right)^{\frac{1}{N}} - 1 \right]$$

حاصل می شود

نی غایت مهم در حالت استاندارد بدست آوردیم حال برای تغییر حالت به حالت استاندارد لازم است:



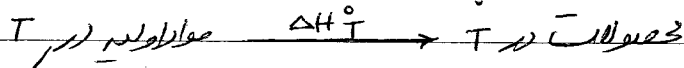
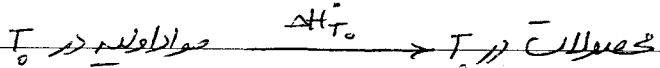
برای تغییر حالتی مانند تبدیل H_2O مایع به H_2O گاز لازم است:



$$3\Delta H_{fg} = 3\Delta H_2^{\circ} \quad \Delta H_3^{\circ} = \Delta H_1^{\circ} + 3\Delta H_{fg}$$

میزان گرماژایی و آنتالپی (۳) از آنتالپی (۱) کمتر است چون در تبدیل مایع به گاز گرما صرف می شود.

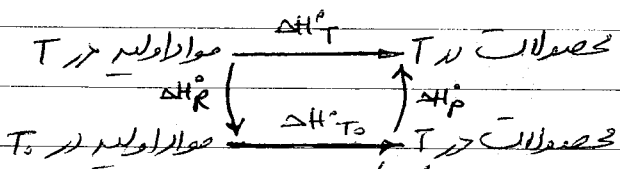
یک واکنش با حالت تغییراتی صورت می گیرد و آنتالپی آن در دماهای مختلف (است و حال) در دماهای اولیه و در دماهای مختلف T :



اگر در دما T_0 مواد اولیه T_0 قرار می دهند (محصولات در حال) و خارج می شوند که در آنجا گرماژایی و آنتالپی در دما T می آید (محصولات با گرماژایی و آنتالپی در دما T در T_0 قرار می گیرند)

$$\Delta H_T^{\circ} = \Delta H_{T_0}^{\circ} + \Delta H_{T_0 \rightarrow T}$$

ΔH به مسیر تحول بستگی ندارد پس می توان مسیر را به شکل زیر در نظر گرفت:



پس ΔH کل گرماژایی است که لازم است با مواد اولیه صادر کرد تا واکنش از T_0 به T برسد. به این گرماژایی ΔH حساس (گرماژایی حساس) $\Delta H_{T_0 \rightarrow T}$ می گویند.

$$\Delta H_R^{\circ} = \int_T^{T_0} \sum_R (n c_p) dT = - \int_{T_0}^T \sum_R (n c_p) dT$$

n: ضرایب استوکیومتری

$$\Delta H_{T_0 \rightarrow T} = - \int_{T_0}^T (1 \times c_{p, H_2O} + 3 c_{p, O_2}) dT$$

ca'ia'ha

Mix رتقو، $N \geq 2$: $Z_{N,M} = N Z_i$

$$Z_{N,M} = \frac{N}{K} \left[\left(\frac{CA_i}{CAN} \right)^{1/N} - 1 \right]$$

مقاسم اول، $N \geq 2$ با T_P

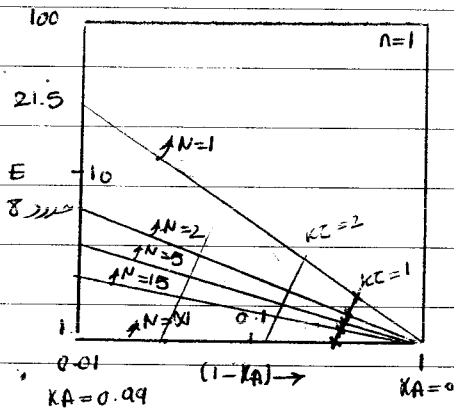
به رتقو بتبديل كسابل

و CA_i كسابل كسابل

$$\Rightarrow CA_i = CAN \Rightarrow E = \frac{K Z_{N,M}}{K T_P} = \frac{N \left[\left(\frac{CA_i}{CAN} \right)^{1/N} - 1 \right]}{\ln \frac{CA_i}{CAN}}$$

براي مسته رتقو نسبت رتقو CA_i ، CAN كسابل و رتقو N نسبت، رتقو XA است. رتقو E بتبديل رتقو N في رتقو

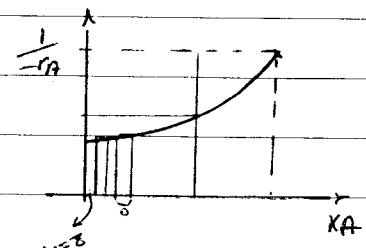
$$XA = 1 - \frac{CA_i}{CAN}$$



رتقو E بتبديل رتقو N في رتقو
رتقو E بتبديل رتقو N في رتقو
رتقو E بتبديل رتقو N في رتقو

بالتقريب رتقو رتقو Mix كسابل رتقو رتقو رتقو
رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو
رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو

رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو
رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو
رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو رتقو



$$Z_{N,M} = \frac{\infty}{K} [1 - 1] = \infty \times 0 = \text{مجموع}$$

$$\xrightarrow{\text{ارفع ارقام}} Z_{N,M} = T_P$$

$$N = \frac{1}{T} \Rightarrow Z_{N,M} = \frac{\left[\left(\frac{CA_i}{CAN} \right)^T - 1 \right]}{KT} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{\lim_{T \rightarrow 0} \left(\frac{CA_i}{CAN} \right)^T - 1}{K} \frac{CA_i}{CAN} = \ln \frac{CA_i}{CAN}$$

$$Z_{\infty,M} = T_P$$

باراشتن برای حالت Mix یعنی خلافت تبدیل عرضی می شود و این همان اتفاقی است که در Mix و plus انجام می شود.
 اما اینها ظاهر کار بود و کار با مثل یک جریان واقعی در یک طرف واقعی را مدل می کنیم با N Mix (مدل مخزن است سه هم)

مقاسب در هم، مقاسب تبدیل یا رزیم تبدیل

$$\tau_{N,M} = \tau_p \Rightarrow$$

برای مقاسب K ها را با τ یک می گذاریم و برای آن یکبار N را یک می گذاریم و تبدیل را درست می آوریم و بار دیگر $N=2$ و تبدیل را درست می آوریم و همین ترتیب ادامه می دهیم تا K های مختلف در N های مختلف تبدیل را درست آوریم و نمودارهای آن را در جدول درج می کنیم ($KC=1$ و $KC=2$ و ...)

این مراحل در هر دو حالت در هم همین صورت است صرفاً با KCA که در آن صورت K در اول K بی بعد است و در KCA بی بعد است و فقط شکل معادلات عرضی می شود.

ماسب ستاندرم

برای حالت در هم در هم

$$\tau_i = \frac{CA_{i-1} - CA_i}{-r_A} \quad \text{برای رکتور نام}$$

$$\frac{1}{\tau_i} = -r_A = KCA_i^2$$

$$K\tau_i CA_i^2 + CA_i - CA_{i-1} = 0$$

$$CA_i = \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 4K\tau_i CA_{i-1}}}{2K\tau_i} \Rightarrow CA_i = \frac{-2 + 2\sqrt{1 + 4K\tau_i CA_{i-1}}}{4K\tau_i}$$

$$i=1 : CA_1 = \frac{-2 + 2\sqrt{1 + 4K\tau_1 CA_0}}{4K\tau_1}$$

$$CA_2 = \frac{-2 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{1 + 4K\tau_1 CA_0}}}{4K\tau_2}$$

$$CA_3 = \frac{-2 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{1 + 4K\tau_1 CA_0}}}}{4K\tau_3}$$

$N=1$: مقایسه 1 راکتور Mix با یک راکتور Plug

برای رانندگی در E

با نسبت شدن N به این اصل از $N=1$

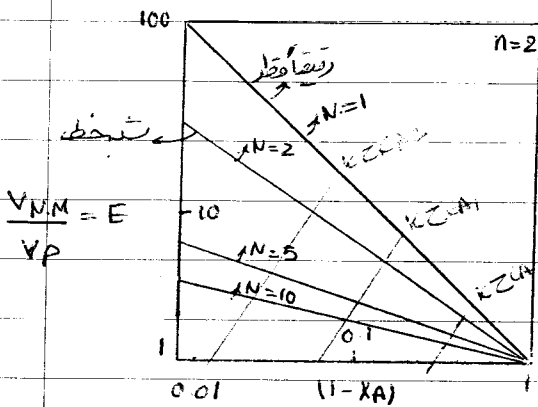
رضایت بیشتری شود

بروالتی در K ثابت است (بی تغییرات)

برای هر مقایسه تبدیل ها در حجم برابر $KZCA$

را ثابت در نظر می گیریم و خطوط مربوط

را می کشیم



شکل

"مقایسه در تبدیل یکسان"
"مقایسه در حجم یکسان"

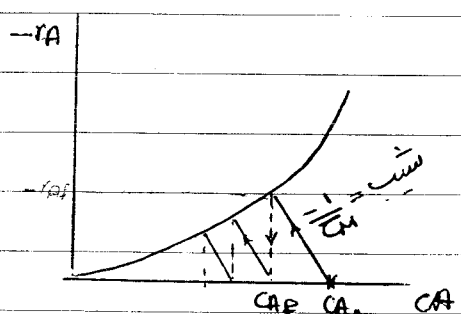
موازی هستن راکتورهای Mix به ضد است چون خلقت به یکباره از CA_0 به CA میرسد

مسئله 4 : در این مسئله فرض می کنیم راکتورهای که می خواهیم بطور سری پیوسته هم اندازه باشند

$$MFR = \Rightarrow Z_M = \frac{CA_0 - CA_F}{-r_A F}$$

$$\frac{1}{C_M} = \frac{-r_A F}{CA_0 - CA_F}$$

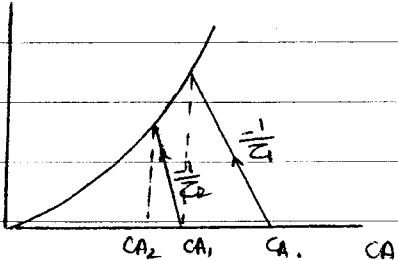
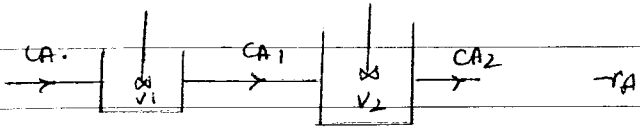
$$\frac{-1}{C_M} = \frac{-r_A F - 0}{CA_F - CA_0}$$



با بریدن تدریجی می توان خلقت جزئی از راکتور Mix را پیدا کرد

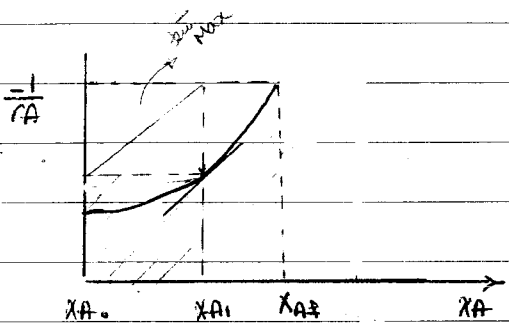
$$\text{نسبت} = \frac{\text{تفاضل عمودی}}{\text{تفاضل افقی}}$$

حس اگر از نقطه ورودی خطی با شیب $\frac{1}{C_M}$ رسم کنیم نقطه تلاقی این خط با منحنی $-r_A - CA$ نقطه CA_F بدست می آید در این روش برای هر نسبتی سوال استفا ده کرد
راکتورهای هم اندازه باشند خطوط همگی با هم موازی می شوند و کار خلقت غیر هم اندازه نسبت مساویان خواهد بود

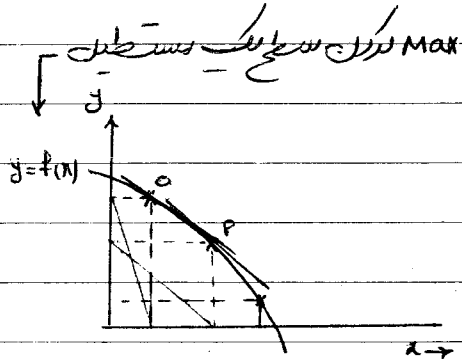


مخولار و التورخا Mix عديم اراده و في التورخا عديم اراده

مسئله 5: فرض کنید تابع تغییرات $\frac{1}{\alpha}$ بر حسب x_A به شکل زیر باشد و x_{AF} معلوم در $\frac{1}{\alpha}$ میخواسیم رو آ التور Mix (که وضعیت دیگری از یک التور Mix دارد - سطح زیر نمودار است) کو بقیتر است یا بدتریم.



تبدیل میانی تابع حجم التور اول در دم می باشد
 تبدیل میانی التور تغییر در حجم مجموع انجام نیز
 تغییر می کند پس در این مسئله میخواسیم التور
 تبدیل میانی را مجموع انجام التور و برابر است
 در دم. اگر طراح را بر اساس این التور انجام
 در دم از نظر اندازه بیشترین سود را میخواسیم بد
 x_{A1} : تبدیل خوبی از التور اول
 x_{AF} : تبدیل خوبی از التور دوم

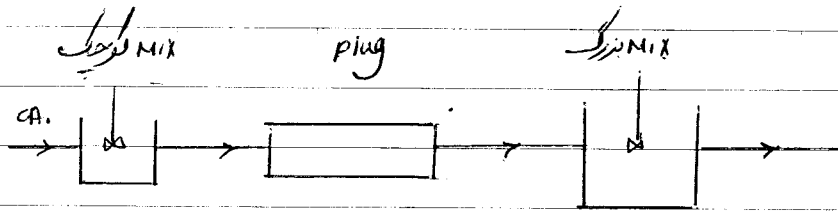


Max کردن سطح مستطیل
 $A = xy$
 $dA = 0 \Rightarrow x dy + y dx = 0$
 شیب تانژن $= \frac{dy}{dx} = -\frac{y}{x}$

سین در دم این نقطه 'o' نقطه خوبی است و شیب تانژن در این نقطه با
 شیب قطر یکی نشده است. ولی نقطه 'P' نقطه خوبی است.
 در نمودار $x_A - \frac{1}{\alpha}$ هم همین روش عمل می کنیم تا Max مستطیل بدست بیاید.

نکته اول: اگر التور دوم 1 باشد و التورها تقریباً هم اندازه می شوند
 نکته اول: اگر در دم سین صفر در یک باشد و التور بزرگ در اول و التور کوچک در دم می شود
 نکته اول: اگر در دم بزرگتر از 1 باشد و التور کوچک اول است و التور دوم بزرگتر می شود.

1

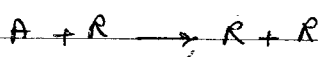


مسئله 7 :

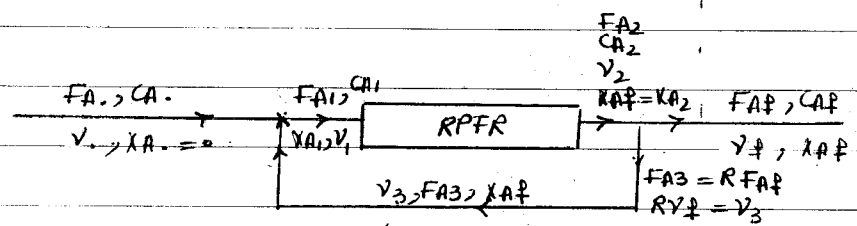
در این جا از رنج از کار داریم تا به تبدیل بیشتر در حجم جاری معین برسیم و آن طرز قرار گرفتن یعنی ترتیب جریه ها را با توجه به حالت و بزرگی هم داریم که باید تبدیل معین حجم جاری از رنج قرار بدهیم که در این جا به حالت اول می پردازیم.

تجدید روح بالا \rightarrow معنی برای Min $\rightarrow n > 1$
 پس مسئله در این صورت است که اگر $n > 1$ باشد جریه ها را می توان تنظیم کرد تا خلقت تا حد امکان زیاد باشد ؟ 1 - plug 2 - Mix کوچک 3 - Mix بزرگ
 و اگر $n < 1$ باشد عمل ترتیب بالا را خواهم داشت.

مسئله 5 :



در فصل 3 و قسمت های اول و وسطی را داشتیم : برای این دست از واکنش ها که واکنش های برگشتی هستند مثلاً این مثال بالا که می توانیم در این حالت به صورت حاصل می آید. بهترین واکنش است که می توان استفاده کرد واکنش بالا برگشتی است.



هدف در این مسئله این است تعیین حجم جریه و واکنش است

حجم برگشتی به روری واکنش = R نسبت برگشتی
 حجم جریه از سیستم $= v_2$

اگر $R=0$ به عمل جریه plug می رسیم $N=0 \sim R=0$
 اگر $R=1$ عمل جریه MIX را خواهم داشت $N=1 \sim R=1$
 در کل با افزایش R عمل جریه MIX نزدیکتری شویم

خواهم سیستم در یک R معین و تبدیل معین هم می خواهم بود در این رزاق R در جریه معین تبدیل هم می خواهم بود.

تقسیم که اگر تبدیل ورودی صفر نباشد حدی است که انتگرال تعریف کند
 اگر F_A صفر باشد F_A و ورودی اشتباهی سردی
 در واقع به ضرورت محل می کنیم که F_{A1} را درست می آوریم
 و تبدیلش با مقدار برابر می رسم پس F_A مواضع داشت

$$\frac{V}{F_A} = \int_{X_{A1}}^{X_{A2}} \frac{dX_A}{-FA}$$

یا
 (در نوبی ورودی - را تصور)

$X_{A1} = X_A$: اگر $R=0$ تابع R است

$X_{A1} = X_{AF}$: اگر $R=\infty$

$X_{A0} < X_{A1} < X_{AF}$: اگر $0 < R < \infty$

سپس باید دو چیز را به یاد کنیم X_{A1} و F_A

مسائل سزای ششم فصل چهارم : 1 - 2 - 3 - 4 - 7

فصل سوم : 25 حدید (20 قسم)

فصل یکم : 23 حدید (5 قسم) - 24 حدید (9 قسم)

مباحثی حل شده ، حل شوند

تقسیم F_A : نقطه X که حجم استیل باک کرده است در جای آن عمل می کنیم

$$F_{A1} = F_A + F_{A3} = F_A + R F_{AF} = F_A + R F_A (1 - X_{AF})$$

$$F_A = F_{A1} \Big|_{X_{AF}=0} = F_A + R F_A = F_A (R+1)$$

$$\Rightarrow \frac{V}{F_A} = \int_{X_{A1}}^{X_{AF}} \frac{dX_A}{-FA} \Rightarrow \frac{V}{F_A} = (R+1) \int_{X_{A1}}^{X_{AF}} \frac{dX_A}{-FA}$$

$$X_{A1} = \frac{1 - CA_1/CA}{1 + EA CA_1/CA} \quad , \quad CA_1 = \frac{F_{A1}}{V_1} \quad (FA - VCA)$$

$$** \quad \frac{F_{A1} = F_A + F_{A3}}{V_0 + V_3} \quad CA_1 = \frac{F_A + F_{A3}}{V_0 + V_3} = \frac{F_A + R F_A (1 - X_{AF})}{V_0 + R V_{AF}}$$

است چون را نسبت ثابت است
 در یک زاویه باید مواضع ثابت باشد
 که حل کردن شود که را به تقریب
 همین شد البته از راه

$$V_{AF} = V_0 (1 + EA X_{AF})$$

$$\Rightarrow CA_1 = CA \frac{1 + R(1 - X_{AF})}{1 + R(1 + EA X_{AF})}$$

سپ از جابجایی در فرم مستقیم
و ساده کردن

$$X_{A1} = \frac{R}{R+1} X_{AF}$$

صورتی که در فرم مستقیم است

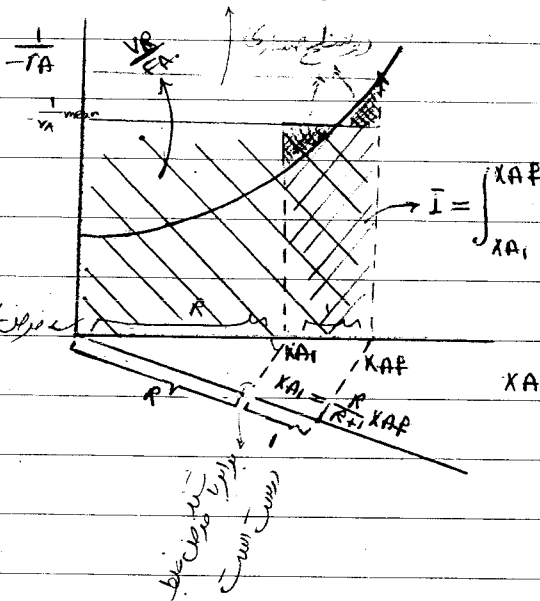
$$\Rightarrow \frac{V_R}{F_{A0}} = (R+1) \int_{\frac{R}{R+1} X_{AF}}^{X_{AF}} \frac{dX_A}{-r_A}$$

$$\frac{V_R}{F_{A0}} = (R+1) I$$

است

این مستطیل بزرگ در $R = \infty$ مربوط به Mix

اگر میخواهیم از نظر هندسی این کار را کنیم:



با این مستطیل بزرگ و کوچک از فرم مستقیم
فرمی که این خط از مبدأ تا انتهای R می کشیم
تعداد R بار این مستطیل را می کشیم و از نظر
انتگرالی X_{AF} وصل کرده و از انتهای R
موازی می کشیم و طبق قضیه است
یعنی $X_{A1} = \left(\frac{R}{R+1}\right) X_{AF}$ می شود
سپس از X_{A1} به طور عمود بر خط مستقیم
تا خطی را می کشیم که وسط زیر منحنی
و این مستطیل بزرگ است

خط (موازی) را طوری می کشیم تا وسط منحنی برسد

$$I = \int_{X_{A1}}^{X_{AF}} \frac{dX_A}{-r_A} = \left(\frac{1}{-r_A}\right)_{\text{mean}} (X_{AF} - X_{A1})$$

$\frac{1}{-r_A}$ در مقدار متوسطی است فرض شده است و از
انتگرال بیرون می آید

$$X_{AF} - X_{A1} = X_{AF} - \frac{R}{R+1} X_{AF} = \frac{X_{AF}}{R+1} \Rightarrow \frac{V_R}{F_{A0}} = (R+1) \left(\frac{1}{-r_A}\right)_{\text{mean}} \left(\frac{X_{AF}}{R+1}\right)$$

$$\frac{V_R}{F_{A0}} = \left(\frac{1}{-r_A}\right)_{\text{mean}} \times X_{AF}$$

نوع RPF : $R=0$: Plug

نوع MIX : $R=\infty$

$$X_{AF} = X_{A1}$$

فکت! اگر R و 1 را در یک محور افقی در نظر بگیریم. نسبت $\frac{CA}{CA_0}$ را می‌توانیم فرض کنیم که برابر با x_A است. (مگر در صورتی که x_A را به عنوان $\frac{CA}{CA_0}$ در نظر بگیریم)

حالت : $I = \left(\frac{-1}{r_A}\right)_{\text{mean}} x_A = \left(\frac{-1}{r_A}\right)_{\text{mean}}$
 $\Rightarrow I(R+1) = \frac{VR}{FA}$

$EA=0$ حالت خاص : $CA = CA_0(1 - x_A)$
 $\frac{\tau_R}{CA_0} = (R+1) \int_{x_{AF}}^{x_{AF}} \frac{dx_A}{-r_A}$
 $\tau_R = (R+1)(-1) \int_{x_{AF}}^{CA_0+RCAP} \frac{dCA}{-r_A}$
 می‌توانیم شکل آن را در نمودار زیر مشاهده کنیم :

1) $CA_1 = CA_0 \frac{1+R(1-x_{AF})}{1+R(1+EAx_{AF})}$, $x_A = \frac{R}{R+1} x_{AF}$, $EA=0$

2) $CA = CA_0(1 - x_A)$, $x_A = \frac{R}{R+1} x_{AF}$, $x_{AF} = 1 - \frac{RCAP}{CA_0}$

می‌توانیم : $\frac{CA_0 + RCAP}{R+1}$
 $\Rightarrow \tau_R = (R+1) \int_{RCAP}^{\frac{CA_0 + RCAP}{R+1}} \frac{dCA}{-r_A}$
 که در نمودار زیر مشاهده می‌کنیم

تفسیر هندسی حالت خاص

در ابتدا باید بدانیم که CA_0 و $RCAP$ نسبت به هم معلوم است (از نظر هندسی)

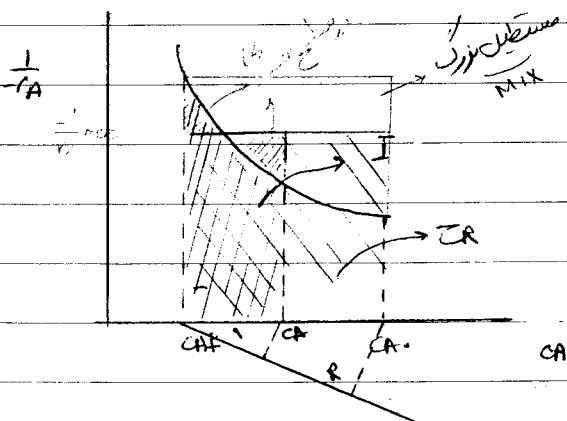
و بعد معلوم می‌کنیم که CA (از نظر هندسی) :

$$CA - RCAP = \frac{CA_0 + RCAP}{R+1} - RCAP$$

$$= \frac{CA_0 + RCAP - RRCAP - RCAP}{R+1}$$

$$= \frac{CA_0 - RCAP}{R+1}$$

$$\frac{CA - RCAP}{CA_0 - RCAP} = \frac{1}{R+1}$$



یعنی CA جاری است که توسط CA و CAP را نسبت او R حساب کنید و مانند قبل عمل کنید (یعنی به رخواه می کشیم و مقادیر R+ او را اجداد می کشیم و ...)

$$I = \int_{CAP}^{\frac{CA_0 + RCAP}{R+1}} \frac{dCA}{-rA}$$

$$Z_R = (R+1) I$$

$$I = \left(\frac{1}{-rA} \right)_{\text{mean}} \times (CA - CAP) = \left(\frac{-1}{rA} \right)_{\text{mean}} \times \frac{CA_0 - CAP}{(R+1)}$$

$$Z_R = \left(\frac{-1}{rA} \right)_{\text{mean}} (CA_0 - CAP)$$

$$R = 0 \Rightarrow \text{حالت سطح زیر صاف} \Rightarrow \text{plug}$$

$$R = \infty \Rightarrow \text{سطح زیر مستطیل بزرگ} \Rightarrow \text{MIX}$$

حال باید نظر کنیم بر این حالت 1 و R روی کاغذ افقی (یعنی CA) همان تندی قبل می رسم

حالتی خواهیم برای دو حالت اول در رسم و التور نمودار با بار التور plug مقایسه کنیم
 1- مقایسه تبدیل روجم کشید
 2- مقایسه حجم در تبدیل کشید

برای حالت اول : $-rA = kCA$

$$kZ_R = (R+1) \int_{CAP}^{\frac{CA_0 + RCAP}{R+1}} \frac{dCA}{CA}$$

$$kZ_R = (R+1) \ln \frac{CA_0 + RCAP}{(R+1)CAP}$$

$$kZ_R = (R+1) \ln \frac{1 + R \frac{CAP}{CA_0}}{(R+1) \frac{CAP}{CA_0}} \quad (1)$$

$$R=0 \rightarrow kZ_P = \ln \frac{CA_0}{CAP} \quad (2)$$

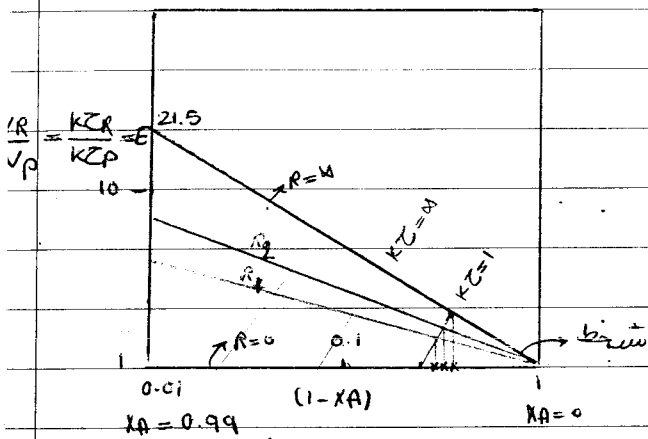
از ابتدا هم برودر حالت اول در التور بزرگ همین تندی رسم نمودیم

$$CAP = CA \cdot (1 - XAP)$$

حال اگر CA ، CAP و XAP معلوم باشد:

$$(1) - (2) \Rightarrow K_{CR} = E = f(R, XAP)$$

و اگر XAP هم معلوم باشد E تابعی از R می شود و هر یک K_{CR} و $Recycle$ را می توان از آن بداند و اگر R هم معلوم باشد E عددی می شود. حال نسبت به R و XAP دو رسم می کنیم: این مقایسه در فضای یکسان، (و با حجمی یکسان صورت گرفته است) در صورتی که اول R ها خالی به حفظ نریزید.



مقایسه حجم ها در تبدیل یکسان ۱۶-۶

در مقایسه تبدیل ها در حجم یکسان باید K_{CR} ، K_{CP} و XAP معلوم باشد. نسبت به R ها مختلف، $\frac{CAP}{CA}$ های مختلف، XAP های مختلف نسبت به آن. در رسم شکل تبدیل ها را بدست می آوریم که با نقاط X مشخص شده اند و منظور نمودار است خطوط مربوطه و اصل می کنیم در نسبت K_{CR} بدست می آید و در شکل برعکس است حجم را داریم و نسبت K_{CR} و R معلوم است نسبت به R ثابت، K_{CR} ثابت، یا XAP قطع می کنیم تا نقطه XAP با رسم خط نمودار به پایین نسبت کنیم.

مقایسه Plug و Mix

($N=1$ معادل است با $R=1$) (شکل قبلی) K_{CR} ، N می شود و در این جا K_{CR} و R معلوم واقعی Mix، راکتور یک حالت ایده آل برای راکتور همین کار است و چون محدودیت در حجم و دما ندارد Mix flow Reactor بودن نسبت و اندازه ال بودن بدلیل شدت رابطه یکسان محصول خروجی و شدت رابطه داخل ظرف است اصل و دلیل می تقسیم راکتور Mix برش کار در بین شدت ورودی و خروجی داشته ایم: (اصل جریان و نسبت) $XAP = f(\dots)$ که نسبت راکتور (Plug، Mix، ...) خواص است و اصل جریان را از آن حاصل می شود. نام ترسیم داریم. ترسیم ساده ای است که قابل ردیابی باشد و از طریق گرفتن پاسی به اصل جریان پی می بریم. مانند نمودار (و استیو) بود نسبت رنگ (مانند شش رنگ است) رنگ آن

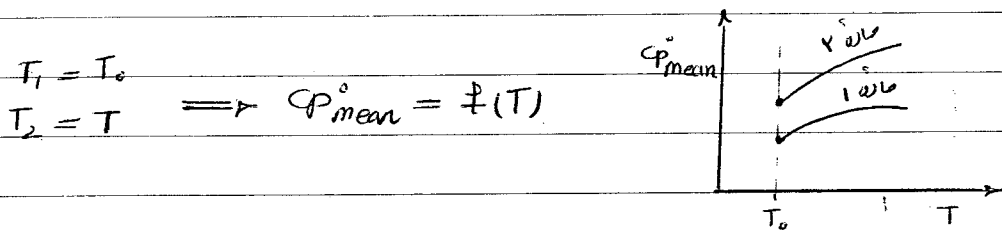
C_p تابع مستقیم است چون اگر گاز باشد تمام گازها در فشار یا پس از آن طویل فرکانس می شوند و اگر جاذب و مایع باشد در فشار 1 atm در نظر گرفته می شود و C_p فقط تابع دما است.
 برای گازهای آبی:

$$C_p = A + BT + CT^2 + DT^{-2}$$

$$\int_{T_0}^T C_p \cdot dT = C_{p, \text{mean}} \int_{T_0}^T dT \implies C_{p, \text{mean}} = \frac{\int_{T_0}^T C_p \cdot dT}{(T - T_0)}$$

$$C_{p, \text{mean}} = \frac{\int_{T_1}^{T_2} C_p \cdot dT}{T_2 - T_1} = A + B \frac{T_1 + T_2}{2} + \frac{C}{3} (T_1 + T_2 + T_1 T_2) + \frac{D}{T_1 T_2}$$

$$\implies \Delta H_R^\circ = \int_T^{T_0} \sum (n C_p) dT = - \int_{T_0}^T \sum (n C_p) dT = - \sum (n C_{p, \text{mean}}) (T - T_0)$$



هر دانه ای C_p° خاص خود را دارد و مشخصی های بالا در حالتی است که $T_1 = T_0$ باشد. برای آن یونان نیاز است. A ، B و C و P و ΔH_R° و ΔH_f° است.
 نیز T_1 تا T_2 یا T_0 تا T_1 و T_0 تا T_2 یا T_0 تا T_2 برابر است.

ΔH_R° گرمای لازم برای رساندن محصولات از T_0 تا T است

$$\Delta H_R^\circ = \int_{T_0}^T \sum_P (n C_p) dT = \sum_P (n C_{p, \text{mean}}) (T - T_0)$$

$$\Delta H_T^\circ = \Delta H_R^\circ + \Delta H_{T_0}^\circ + \Delta H_P^\circ$$

$$\Delta H_T^\circ = \Delta H_{T_0}^\circ + \left[\left(\sum_P n C_{p, \text{mean}} \right) - \left(\sum_R n C_{p, \text{mean}} \right) \right] (T - T_0)$$

با مقدار دانه تابع $C_{p, \text{mean}}$ ، تابع ΔH_T° نسبت به $\Delta H_{T_0}^\circ$ در مقدار نسبت به دما تابع است و مقدار آن با مقدار $\Delta H_{T_0}^\circ$ برای درجه های مختلف تابع مقدار هم نسبت $n C_{p, \text{mean}}$ برای محصولات و $n C_{p, \text{mean}}$ برای مواد اولیه معمولاً هم مرتبه اند نسبت به دما. مقدار $\Delta H_{T_0}^\circ$ و ΔH_T° معمولاً یکسان نخواهد شد و (مقدار گرمای لازم برای رساندن مواد اولیه از T_0 تا T و $\Delta H_{T_0}^\circ$ هم برابر است)

مثلاً در راکتور دوره ای مدل جریان تک پارامتری داریم
 در تعریف Plug flow داریم که بدون سرعت سطح باشد ولی این تعریف در اصل یک تئوری است

Resistance time distribute

در راکتور پلاگ می گوئیم RTD توزیع زمان اقامت اندازیم یعنی RTD نشان است و یک
 در Mix این گونه نیست. در یک ظرف که جریان Mix flow دارد چون یک ظرف اقامت
 دارند از صفر تا یک زمان و این توزیع exp نزدیک است. در واقع RTD یک صفت از مدل
 جریان است و اگر مدل جریان معلوم باشد، RTD هم معلوم می شود و می توانیم این مطلب
 درست کنیم.

مدل جریان تابع سه چیز است: τ (مدل 1) و R (مدل 2) و CA_0 (مدل 3)
 عنوان مثال در تئوری انتقال هم داریم که از آنجا که مدل مستقیم RTD دارند
 توزیع اقامت exp تئوری است که در واقع Mix flow فرض شده است.

$$\int_0^{\infty} \varphi d\theta = 1$$

$$\varphi = se^{-s\theta}$$

↑ از آنجا

و حال برای و الفس در جابجایی

$$\tau R = (R+1) \int_{CA_0}^{\frac{CA_0 + R \cdot CA_0}{R+1}} \frac{dCA}{K \cdot CA^2}$$

$$K \tau R = (R+1) \left[\frac{1}{CA_0} - \frac{R+1}{CA_0 + R \cdot CA_0} \right]$$

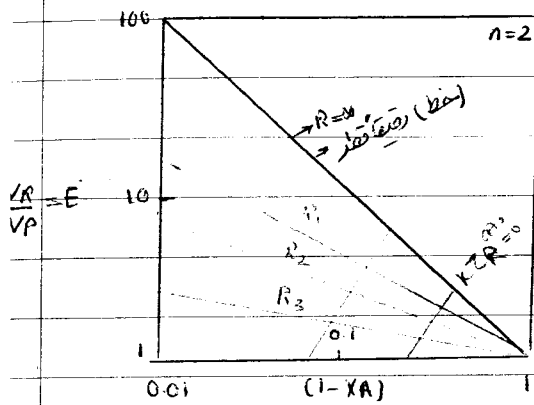
$$K \tau R \cdot CA_0 = (R+1) \frac{\left(1 - \frac{CA_0}{CA_0 + R \cdot CA_0}\right)}{\frac{CA_0}{CA_0 + R \cdot CA_0}} \quad (1)$$

$$K \tau R \cdot CA_0 = \frac{1 - \frac{CA_0}{CA_0 + R \cdot CA_0}}{\frac{CA_0}{CA_0 + R \cdot CA_0}} \quad (2)$$

$$(2) \div (1) \Rightarrow \frac{K \tau R}{K \tau R} = E = \frac{V_R}{V_P} = f(R, X_{AF})$$

حال در تبدیل نشان هم داریم در حجم نشان تبدیل ها را مقایسه می کنیم و تمام مراحل ساده
 در حد اول است (عدد اول و...) و نتیجه را در دستگاه مقیاسات log-log رسم می کنیم

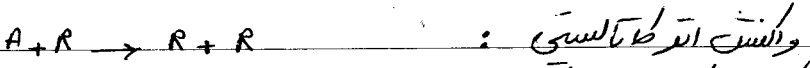
تبدیل عدد داریم و معادله را در این عدد ثابت حل کنیم



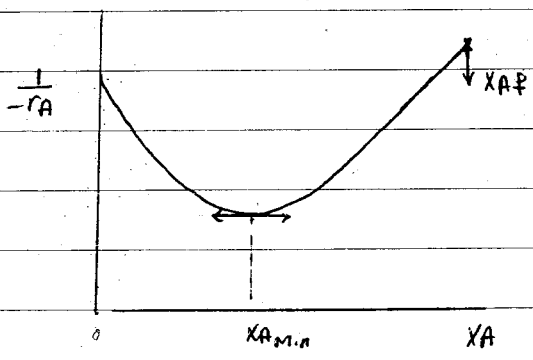
« مقایسه حجم در تبدیل گسیل » 6-17

یکی از موارد استفاده از تئوریهای برگشتی در واکنش های آتو کاتالیزی است. اگر یک واکنش آتو کاتالیزی در التور بلاگ معمولی داشت، با ششم تبدیل حاصل نمی رسیم چون در ابتدا محصول تولید می کند و التور Mix تبدیل میسر می شود در صورتی که در واکنش محصول تولید می شود و می تواند به صورت مثبت و التور Recycle همیشه مناسب است پس از انتخاب التور، R انهم باید بدست آوریم

تبدیل میان برگشتی



اگر برگشتی این واکنش را در نمودار



رسم کنیم خواهیم داشت:

در منحنی کنیم $-r_A = k C_A C_R$ باشد

در $\frac{1}{r_A}$ می رسم در $X_A = 0.5$ می باشد

نقطه شروع نمودار به مقدار عالی که خارج از دام یا عالی ای که نمودار در ظرف وجود داشت، بستگی دارد.

مکان انتخاب التور از نظر اندازه نمودار $\frac{1}{r_A}$ بر حسب X_A است. اگر نمودار صعودی باشد Plug بهترین است و اگر نزولی باشد Mix بهترین است. در حالتی که این با هم نزدیک داریم، صعودی داریم. که در این جا آن هم تصمیم گرفته است تبدیل برای نمودار ما است. اگر تبدیل از 0.5 ($\frac{1}{r_A}$ می رسم) بهترین است و التور Mix بهترین است و اگر از 0.5 منحنی بیشتر باشد Plug بهترین است و اگر یکی از 0.5 بیشتر باشد Mix و Plug با هم فرقی ندارند و یکی در این حالت معمولاً از التور بلاگ برگشتی استفاده می کنیم و این در مواقعی است که جزو تصمیم نیک و التور

استفاده کنیم و یک اثر خواصم از دور افتور استفاده کنیم تا نقطه $x_A = 0.5$ Mix بطرفی برسیم
 وارز 0.5 به بعد از Plug استفاده می کنیم و یک بهترین حالت این است که تا $x_A = 0.5$ از افتور
 Mix استفاده کرده وارز 0.5 به بعد از separation استفاده کنیم (به دست همای compact
 یعنی در یک سیستم هم واکنش انجام شود حجم در اسازگی انجام می شود مثلاً بار رسیدن به تبدیل 0.2
 وارد دستگاه جداسازی می کنیم و مواد تبدیل شده را جدا کرده در دوباره وارد افتور می کنیم و برای ترتیب
 مثلاً تبدیل 0.8 میسوم)

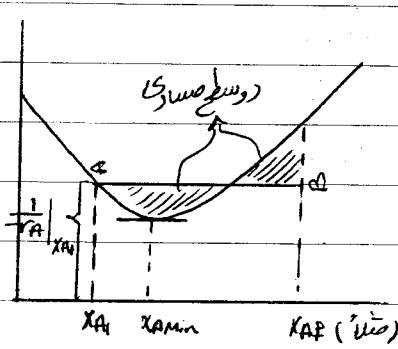
مسئله: اگر در واکنش اتوطالستی خواصم از افتور برگشتی استفاده کنیم R بین واحدها پیدا
 کنیم؟

$$R_{opt} = ?$$

برای است که R_{opt} را با اساس می بینیم حجم تعیین می کنیم
 در افتور برگشتی (Recycle plug flow reactor) R بین این ضایع R ای است که امکان x_{A1} ای
 بهره نه ان x_{A1} امکان $\frac{1}{-r_A}$ ای بهره که برابر باشد با متوسط $\frac{1}{-r_A}$ بین x_{A1} تا x_{AP} و
 این حال سینه مشتق کنی برای رسیدن به حجم می بینیم است

$$x_{A1} = \frac{R}{R+1} x_{AP} \quad \text{ثابت کردیم در افتور برگشتی}$$

$$\int_{x_{A1}}^{x_{AP}} \frac{1}{-r_A} dx_A = \frac{1}{x_{AP} - x_{A1}} = x_{AP} \int_{x_{A1}}^{x_{AP}} \frac{1}{-r_A} dx_A = \left(\frac{1}{-r_A} \right)_{mean} = \left(\frac{1}{-r_A} \right)_{(x_{A1})}$$



از نظر هندسی یعنی صورت صبرگی بالا
 بصورت معادل است
 خط افقی AB را آندر بار بگیریم تا در وسط
 با هم برابر شوند و در این صورت رابطه بالا
 ارضای می شود: در واقع مساحت مستطیل با
 مساحت زیر منحنی برابر می شود.

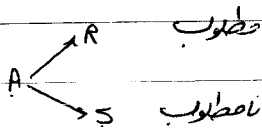
رابطه بالا بدین صورت بدست می آید:

$$\frac{V_R}{F_A} = \frac{\bar{t}_R}{C_A} = (R+1) \int_{x_{A1} = \left(\frac{R}{R+1}\right)x_{AP}}^{x_{AP}} \frac{dx_A}{-r_A} = \int_{x_{A1} = \left(\frac{R}{R+1}\right)x_{AP}}^{x_{AP}} \frac{dx_A}{(R+1) \frac{-r_A}{C_A}}$$

$$\Rightarrow F(R) = \int_{a(R)}^{b(R)} f(x, R) dx$$

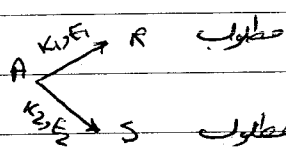
$$\frac{dF(R)}{dR} = \int_{a(R)}^{b(R)} \frac{\partial f(x, R)}{\partial R} dx + f(b, R) \frac{db}{dR} - f(a, R) \frac{da}{dR}$$

بیان فصل 6



فصل هفتم: ^{والشئ خاصه در موردی که در آن} **مستند** حجم در این فصل این است که توزیع محصول به چه صورتی است. در بعضی مواقع این اصل تا اندازه بالایی

ریک جنبه دگر در برخی مواقع هم اندک برخلاف جهت در این صورت برای توزیع محصول مطلوب بیشتر اندازه برای محمول مطلوب می شود در واقع یعنی توزیع محصول تا اندازه راحتی استماع قرار میدهد. (برو فصل 7 و 8. $\epsilon_A = 0$ در نظر گرفته می شود که ما در واقع خارج از استماع است)



$$r_R = k_1 CA^\alpha$$

مقدار ربح α

$$r_S = k_2 CA^\beta$$

مقدار ربح β

بحث کیفی:

مقدار R توزیع شده

$$\Rightarrow \frac{r_R}{r_S} = \frac{k_1}{k_2} CA^{\alpha-\beta}$$

مقدار S توزیع شده

می خواهم این نسبت را در یک سود به این طرف $\alpha - \beta$ مثبتی دارد:

والشئ مطلوب ربح این بیشتر است $\Rightarrow \alpha > \beta \Rightarrow \alpha - \beta > 0$: حالت اول
 در نتیجه باید تا آن جا که می توانیم خلقت را بالا نگه داریم تا نسبت $\frac{r_R}{r_S}$ بزرگ شود هر چه خلقت بالا برود نفع و ارزشی شده است که ربح این بزرگتر است. با این معیار هم می توانیم
 1- برای α بزرگ از ربح β است. استاده می کنیم هر چه در بالا خلقت برآید می شود پس از نظر توزیع محصول و تقویر بلاگ Mix بهتر است در این مورد معمولاً بلاگ نیز نظر اندازه هم با توزیع محصول سازگار است.

2- x_A باید کوچکتر در نظر گرفته شود حین $CA = CA \cdot (1 - x_A)$

3- تا آنجا که ممکن است باید تا حاصل می گیریم کم کرد (موردی که حاصل تر باشد)

4- ضابطه آخر مخصوص برای باز گذاری ($\epsilon_A = 0$) برای باز گذاری هم مطرح است شرط بند تعیین تعداد صل نداشته باشیم) این است که مستار با بزرگتر در نظر گرفته شود.

حالت دوم: $\alpha < \beta \Rightarrow \alpha < \beta$

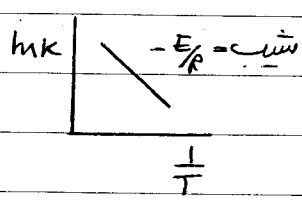
در این حالت باید CA کوک باشد

- 1- در نظر توزیع محصول را با $Mix\ flow$ برساند
- 2- α بزرگ در نظر گرفته شود
- 3- نامحالی ها زیاد باشد
- 4- ستاره کم باشد

حالت سوم: $\alpha = \beta \Rightarrow \alpha - \beta = 0$

یعنی واکنش مطلوب و نامطلوب هم درجه اندکین با هم تفاوتی ندارند

- 1- رطوبت
 - 2- اگر بتوان واکنش را با تالیستی کرد، کاربرد کاتالیزور بهتر
- به این عوامل تأثیر گذار $selectivity$ می گویند که باعث می شود واکنش به محصول مطلوب نزدیک و از محصول نامطلوب دور شود.
- در عدد رطوبت، افزایش رطوبت باعث افزایش واکنش (E) میسر است.
- در فصل آنتروپی را می بینیم



هر چه انرژی آنتروپی بک واکنش میسر باشد به جهت قائم نزدیکتر و میزان حساسیت به دما بیشتر است و برعکس در واکنش ها با E پایین میزان حساسیت در دماهای پایین تر است.

$$k_1 = k_{10} e^{-E_1/RT}$$

$$k_2 = k_{20} e^{-E_2/RT} \Rightarrow \frac{k_1}{k_2} = \frac{k_{10}}{k_{20}} e^{\frac{E_2-E_1}{RT}}$$

$$\frac{d(k_1/k_2)}{dT} = \frac{k_{10}}{k_{20}} \times \frac{E_1-E_2}{RT^2} e^{\frac{E_2-E_1}{RT}}$$

$\frac{k_1}{k_2}$ زیاد می شود بشرط آن که $E_1 > E_2$ یعنی به عبارت دیگر T زیاد شود

E_1, E_2 بر بی گردد یعنی افزایش دما به نفع واکنش اول است

$\frac{k_1}{k_2}$ کم می شود بشرط آن که $E_2 > E_1$ یعنی افزایش دما به نفع واکنش دوم است

که همان نتیجه رسیدیم که افزایش دما به نفع واکنشی است که انرژی آنتروپی میسر است.

و این نتیجه منحصراً واکنش مرکب موازی نیست برای سری هم همین صورت است.



اگر E_1 بزرگتر از E_2 باشد (در حالی که بیشتر تاری کنیم).

و این نتیجه در مورد رویش رفت و برگشتی هم صادق است که در رویش غیر مستعد

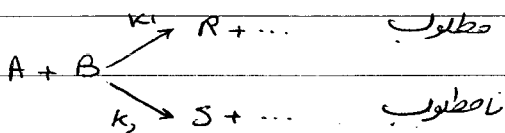


افزایش دما به نفع رویش برگشتی است $\Rightarrow \Delta H_r < 0, E_2 > E_1$ (رویش کمتر)

افزایش دما به نفع رویش رفتی است $\Rightarrow \Delta H_r > 0, E_1 > E_2$ (رویش کمتر)

حالت سوم

مسئله: اگر رویش موازی برآیندی (و یا صافه اولی) است باشد از نظر کیفی به روش نحوه اتصال میسریم یعنی A و B چگونه با هم مخلوط می شوند؟ (معمد در سنت و امثال)



A, B - راه های مختلف قابل مخلوط کردن است که این راه های مختلف بر میزان محصول مطلوب اثر میگذارد.

$$r_R = k_1 C_A^\alpha C_B^\beta \quad \Rightarrow \quad \frac{r_R}{r_S} = \frac{k_1}{k_2} C_A^{\alpha-\alpha'} C_B^{\beta-\beta'}$$

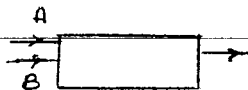
CA باید بزرگ باشد $\alpha - \alpha' > 0$ حالت اول

CB باید بزرگ باشد $\beta - \beta' > 0$

فرض کنید می خواهیم از راکتور batch استفاده کنیم که CA و CB را بزرگ می کند، برای این

طریقه است A, B را با هم بزرگ کنیم. (می توانستیم هر دو را در دره یا A را اول و بعد B را بزرگ کنیم که همان با هم یکجین بهتر است) و راکتور میزاستیم از plug استفاده کنیم یا در

B را با هم از اول بزرگ کنیم و راکتور Mix حین مناسب سنت چون صرف زیاده شدن A و B است.

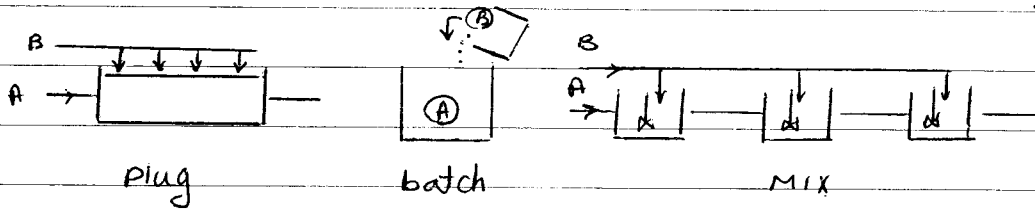


حالت دوم: $\alpha - \alpha' > 0$

$\beta - \beta' < 0$

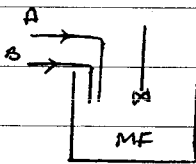
در استفاده از batch در این حالت A را باید از اول بزرگ کنیم و بعد B را در دره (صافه کنیم یا اگر

خواصم از پلاک استفاده کنیم A را زایل وارد کنیم و B را از حالت وارد کنیم و یا اگر خواصم از Mix استفاده کنیم باید از مقدار زیادی Mix Flow استفاده کنیم صفت A را در زایل B را حذف



حالت سوم $\alpha - \alpha' < 0$ $\beta - \beta' < 0$ α با فرقی β هم کوپیک

در این حالت Mix به پلاک است از نظر توزیع محصول A و B را زایل میزدیم و اگر در خواصم از همان استفاده کنیم باید A و B را از مقدار وارد کنیم (که معمولاً از پلاک استفاده نمی شود)



کسر قویله که ظاهر ای یا ای (q) :

$$q(R/A) = q$$

مطلوب R k_1
مطلوب S k_2

توجه شود تعریف q منتهی و المنت های موازی نیست

$$q(R/A) = q = \frac{\text{شماره R در هر لحظه در نقطه}}{\text{شماره A در هر لحظه در نقطه}} = \frac{r_R}{-r_A}$$

$$\text{Or } q = \frac{dc_R}{-dC_A} = q(C_A) \leftarrow r_R = f(C_A)$$

$$\Rightarrow dc_R = -q dC_A$$

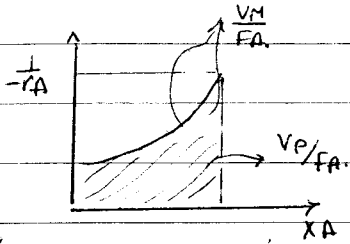
q تابع سینتیک و المنت است (ب) تابعی است از C_A

$$\text{Condition: } C_{R_0} = 0 \Rightarrow C_R = - \int_{C_{A_0}}^{C_A} q dC_A$$

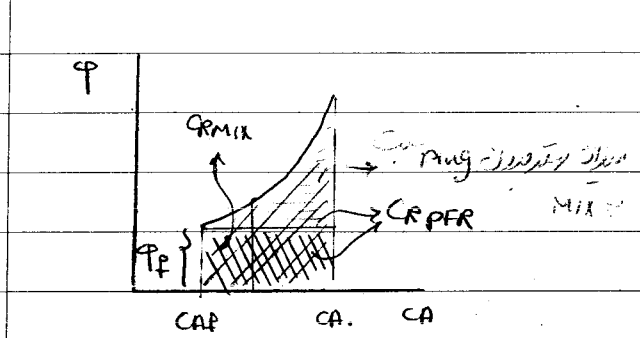
$$C_R = \int_{C_A}^{C_{A_0}} q dC_A$$

حال باید طریقی کنیم CR بزرگ باشد

در فصل از نظر ضریب اندازت معنی $\frac{1}{-r_A}$ را بر حسب x_A در نظر می‌گیریم، میزان بزرگی بلاگ نسبت به MIX به اندازه شدت شیب شکل شده مربوط می‌شود



در این جا باید تابع q بر حسب CA رسم کنیم. در مورد شکل با آن نسبتیم هست، صعودی است و برای در اکثر مواقع صعودی است اما تابع q تابع شکل معنی آن نسبت به $\frac{1}{-r_A}$ بر حسب x_A است



برای بلاگ، q یک تابع پیوسته است. چون CA متغیر تغییر می‌کند، q هم متغیر تغییر می‌کند و نقطه به نقطه تغییر می‌کند. در MIX غلظت در هر دو ورود به غلظت خروجی تبدیل می‌شود و q_p می‌شود (در MIX یک CA نسبت داریم پس یک q داریم)

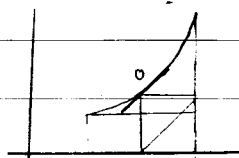
$$CA = \int_{CAP}^{CA} q dCA \quad \xrightarrow{MFR} \quad CRP = q_p (CA - CAP)$$

سهم در این جا به q بر حسب CA صعودی است. بلاگ از نظر توزیع و حصول بهتر است که بر خلاف $\frac{1}{-r_A}$ بر حسب x_A است که حجم کمتر بهتر بود (از نظر ضریب اندازت)

حال که بلاگ بهتر است تبدیل را چه در نظر بگیریم تا CR بیشتر شود؟
 دقت کنید که هم داریم تا CR بیشتر شود و آن تبدیل است بر این صورت که

$\frac{dCR}{dCA}$ را در دست می‌آوریم، مستوی صفر قرار می‌دهیم و مشتق نسبت به CA می‌گیریم. جواب این مشتق $\frac{dCR}{dCA} = 0$ یا $CA = 0$ یا $CA = 1$ خواهد بود. (وقتی نسبت CA کمتر می‌شود سطح بر معنی بیشتر می‌شود)

اگر بخواهیم در این صند از Mix Flow رانور استفاده کنیم از نظر جدی باید q_p را در دست آوریم و CR بر حسب CA نسبت کرده و $\frac{dCR}{dCA} = 0$ و جواب $CA = 0$ خواهد بود. از نظر هندسی باید سطح مستطیل ما که رسم شود قطر مستطیل است و در نقطه q می‌باشد.

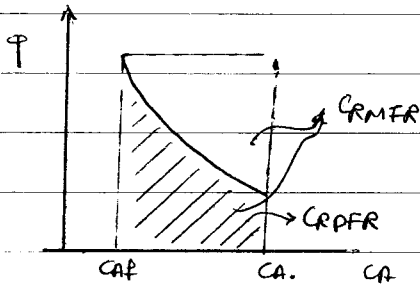


دائر تابع ϕ بر حسب CA نزدیکی باشد از نظر توزیع محصول را القور

Mix ϕ بر حسب CA

از صورت MIX تا ϕ تبدیل استوار در صورت

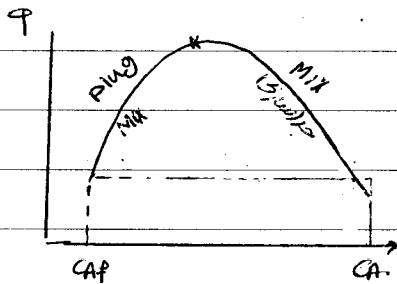
بلاک هم هست



دائر فنی ϕ بر حسب CA شکل زیر باشد

Mix = مستطیل

plug = سطح زیر منحنی



من اگر داشته باشیم :

$$\Phi = \bar{\phi} = \frac{\int_{CA}^{CA_0} \phi dCA}{\int_{CA}^{CA_0} dCA} = \text{میانگین } \phi \text{ در } CA$$

معنای فیزیکی Φ :

$$\bar{\phi} = \Phi = \frac{CRP}{CA_0 - CAP} = \frac{\text{کل R تولید شده}}{\text{کل آرزین رفت}} = \text{yield (نسبت تولید کل)}$$

نکته!

دائر PFR داشته باشیم : $\Phi = \bar{\phi} = \phi_P$

" MFR : $\Phi_M = \bar{\phi}_M = \phi_P$

مکان در MIX یک ϕ نسبت داریم و متوسط ϕ هم بین CA_0 تا CAP صورت می شود.
 ϕ تابع نسبت بود و Φ هم تابع نسبت است و هم تابع نوع را القور

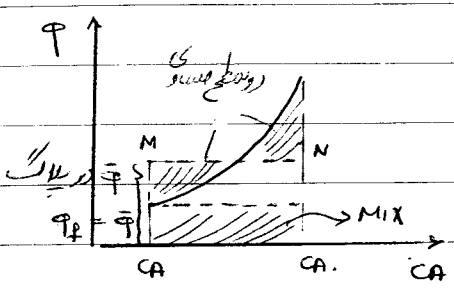
در بعضی مواقع ϕ می شود یا مخالفی را نسبت تولید :

Φ نسبت محصول مخلوط . $\Phi = 1$ تمام آری که از این رفتن به محصول مطلوب تبدیل شده است

مخلوط : مقدار محصول مطلوب تولید شده $\Phi = 1$ مخالفتی $\Phi = 1$

تعیین پهنای Φ :

$\Rightarrow PFR \Rightarrow CR = \int_{CA}^{CA_1} q dCA = \bar{q} (CA_1 - CA)$

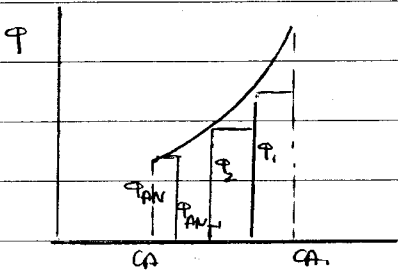


برای \bar{q} با توجه به MN و طولی که داریم در وسط عرضی سوراخ.

MIX $\Rightarrow CR = \bar{q} (CA_1 - CA)$
 \downarrow
 q_f

مثالهای حل شده 5، 6، 7، 8 مثال شدند. (بسیار مشکل بود و راه حل وقت می برد)

در حالتی که $\frac{1}{CA}$ بر حسب λ صورتی می شود وقتی از محلول است سرهم با MIX استفاده کنیم از نظر ضایع، اندازه به نسی، پهنای سوراخ هم (به پلاک نزدیک می شد) در این جا هم همین صورت است.



$CR_f = q_1 (CA_1 - CA) + q_2 (CA_2 - CA_1) + q_3 (CA_3 - CA_2) + \dots + q_N (CA_N - CA_{N-1}) = q_{N,MFR} (CA_1 - CA)$

در صورتی که N ورود به نسی، N آرایش، MIX، به نسی، پهنای سوراخ هم در نظر ضایع، توزیع هم به حال نسی، ضایع، اندازه به نسی.

سری هفتم فصل سوم : 17 آردم - 18 آردم (اجرای عملیات محاسباتی) - 15 آردم
 21 آردم - 28 آردم