

şeklindedir.

İntegral çarpanı;  $I = e^{\int P dx}$

$$I = e^{\int -k_1 dt} = e^{-k_1 t} \quad (2)$$

$$ne^{-k_1 t} = -\int k_2 e^{-k_1 t} dt + C \quad (3)$$

$$ne^{-k_1 t} = \frac{k_2}{k_1} e^{-k_1 t} + C \quad (4)$$

$t = 0$  için  $n = N$  başlangıç koşulundan,

$$C = N - \frac{k_2}{k_1} \quad (5)$$

bulunur. C'nin değeri (4)' de yerine yazılırsa,

$$ne^{-k_1 t} = \frac{k_2}{k_1} e^{-k_1 t} + N - \frac{k_2}{k_1}$$

$$n = e^{k_1 t} \left[ N - \frac{k_2}{k_1} \right] + \frac{k_2}{k_1} \quad (6)$$

bulunur.

**Örnek 1.14 :** Kesikli çalışan tepkime kabında bulunan sıvı benzen, içine püskürtülen klor gazı ile klorlanmaktadır. Reaktör çok iyi karıştırılmakta ve gönderilen klorun tamamı tepkimeye girmektedir. Reaktörden yalnızca tepkimede oluşan hidrojen klorür gazı çıkmaktadır. Maksimum monoklorbenzen verimi elde etmek için reaktöre verilmesi gereken klor gazı miktarını hesaplayalım. Tepkimenin  $55^\circ\text{C}$ ' da izotermal olarak gerçekleştiği ve hız sabitleri oranının;  $(k_1/k_2) = 8.0$  ve  $(k_2/k_3) = 30.0$  olduğu bilinmektedir.  $k_1$ ,  $k_2$  ve  $k_3$ , I, II, III no'lu tepkimelerin hız sabitleridir.



**Çözüm :**

**Temel:** Reaktöre yüklenen 1 mol benzen  
Başlangıçta bileşenlerin mol sayıları (t=0) aşağıda verilmiştir.

Bileşiğin adı	Mol kesri	Mol sayısı
Benzen	$x_a = 1$	$n_a = 1$
Monoklorbenzen	$x_c = 0$	$n_c = 0$
Diklorbenzen	$x_d = 0$	$n_d = 0$
Triklorbenzen	$x_e = 0$	$n_e = 0$

Her bir bileşen için tepkime hızı yazılırsa;

$$\text{Benzen için: } R_a = -k_1 C_a C_b = -k_1 \frac{n_a}{V} \frac{n_b}{V}$$

$$\text{Monoklorbenzen için: } R_c = k_1 C_a C_b - k_2 C_c C_b = k_1 \frac{n_a}{V} \frac{n_b}{V} - k_2 \frac{n_c}{V} \frac{n_b}{V}$$

$$\text{Diklorbenzen için } R_d = k_2 C_c C_b - k_3 C_d C_b = k_2 \frac{n_c}{V} \frac{n_b}{V} - k_3 \frac{n_d}{V} \frac{n_b}{V}$$

$$\text{Triklorbenzen için: } R_e = k_3 C_d C_b = k_3 \frac{n_d}{V} \frac{n_b}{V}$$

bulunur.

**Bileşenler için kütle denkliği :**

$$[ \text{ Giriş Hızı } ] - [ \text{ Çıkış Hızı } ] + [ \text{ Üretim Hızı } ] = [ \text{ Birikim Hızı } ]$$

**1) Benzen için :**

Benzene göre sistem kesikli olduğundan giriş ve çıkış hızları sıfırdır.

$$R_a V = -k_1 C_a C_b V = \frac{dn_a}{dt}$$

$$-k_1 \frac{n_a n_b}{V^2} V = \frac{dn_a}{dt} \quad \Rightarrow \quad -k_1 n_a n_b = V \frac{dn_a}{dt} \quad (1)$$

şeklinde yazılabilir.

2) Monoklorbenzen için:

$$R_c V = \frac{dn_c}{dt} \Rightarrow (k_1 C_a C_b - k_2 C_c C_b) V = \frac{dn_c}{dt}$$

$$(k_1 n_a n_b - k_2 n_c n_b) \frac{V}{V^2} = \frac{dn_c}{dt}$$

$$(k_1 n_a n_b - k_2 n_c n_b) = V \frac{dn_c}{dt} \quad (2)$$

3) Diklorbenzen için:

$$R_d V = \frac{dn_d}{dt} \Rightarrow (k_2 C_c C_b - k_3 C_d C_b) V = \frac{dn_d}{dt}$$

$$(k_2 n_c n_b - k_3 n_d n_b) \frac{V}{V^2} = \frac{dn_d}{dt}$$

$$(k_2 n_c n_b - k_3 n_d n_b) = V \frac{dn_d}{dt} \quad (3)$$

4) Triklorbenzen için:

$$R_e V = k_3 C_d C_b V = \frac{dn_e}{dt}$$

$$k_3 \frac{n_d n_b}{V^2} V = \frac{dn_e}{dt} \Rightarrow k_3 n_d n_b = V \frac{dn_e}{dt} \quad (4)$$

(1) ve (2) denklemleri oranlanırsa;

$$\frac{V(dn_c / dt)}{V(dn_a / dt)} = \frac{k_1 n_a n_b - k_2 n_c n_b}{-k_1 n_a n_b} \Rightarrow \frac{dn_c}{dn_a} = \frac{k_2 n_c}{k_1 n_a} - 1$$

$k_2/k_1$  oranı denklemde yerine yazılırsa,

$$\frac{dn_c}{dn_a} = \frac{n_c - \delta n_a}{\delta n_a} \quad (5)$$

elde edilir. (5) denklemi homojen bir diferansiyel denklemdir. Çözümü için  $y = ux$  dönüşümü yapılır.

$$n_c = u n_a$$

$$\frac{dn_c}{dn_a} = u + n_a \frac{du}{dn_a}$$

elde edilir. Bu değerler (5) denkleminde yerine yazılır ve düzenlenirse;

$$u + n_a \frac{du}{dn_a} = \frac{un_a - 8n_a}{8n_a} = \frac{u - 8}{8}$$

$$n_a \frac{du}{dn_a} = \frac{-7u - 8}{8}$$

$$\frac{dn_a}{n_a} = \frac{8du}{-7u - 8}$$

Değişkenlerine Ayrılabilen Diferansiyel Denklemi bulunur.

$$\int \frac{dn_a}{n_a} = - \int \frac{8du}{7u + 8}$$

$$\ln(n_a) = - (8/7) \ln(7u + 8) + \ln I$$

elde edilir.  $u = n_c/n_a$  dönüşümü yukarıda yerine yazılırsa,

$$\ln(n_a) = - (8/7) \ln(7n_c/n_a + 8) + \ln I$$

$$n_a = I \left[ \frac{7n_c}{n_a} + 8 \right]^{-8/7}$$

elde edilir.  $t = 0$ ,  $n_a = 1$  ve  $n_c = 0$  başlangıç koşulundan;

$I = 8^{8/7}$  bulunur. Buna göre;

$$n_a = 8^{8/7} \left[ \frac{7n_c}{n_a} + 8 \right]^{-8/7} \quad (6)$$

elde edilir. (6) eşitliğinden  $n_c$  çekilirse;

$$n_c = \frac{8}{7} (n_a^{1/8} - n_a) \quad (7)$$

bulunur. Benzer şekilde (1) ve (3) denklemlerini oranlandığında;