

ΑΡΧΕΣ ΠΑΡΑΓΩΓΗΣ ΚΑΙ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗ ΥΛΙΚΩΝ ΚΑΙ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ

Βαθμός προόδου

Παρουσίαση 6

Περιεχόμενα

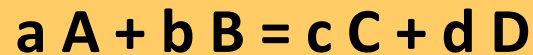
1. Τι είναι **βαθμός προόδου** μιας χημικής αντίδρασης.
2. Πως υπολογίζονται οι τελικές ποσότητες των συστατικών με βάση το βαθμό προόδου της χημικής αντίδρασης.
3. Τι είναι **βαθμός μετατροπής** ενός αντιδρώντος.
4. Τι είναι **περιοριστικό αντιδρών** ή **αντιδρών σε περίσσεια**.
5. Παράδειγμα Φρύξης σιδηροπυρίτη.
6. Παράδειγμα Σύνθεσης μεθανόλης.
7. Παράδειγμα Σύνθεσης αμμωνίας.

Βαθμός Προόδου Αντίδρασης

Τι είναι βαθμός προόδου μιας χημικής αντίδρασης και πως μπορεί να μας διευκολύνει στους υπολογισμούς των ποσοτήτων των τελικών προϊόντων μιας χημικής αντίδρασης.

Βαθμός Προόδου Αντίδρασης

Θυμίζουμε ότι για τη χημική αντίδραση

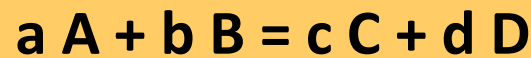


από τη *στοιχειομετρία* προκύπτει ότι:



Βαθμός Προόδου Αντίδρασης

Θυμίζουμε ότι για τη χημική αντίδραση



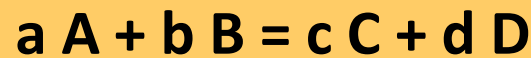
από τη *στοιχειομετρία* προκύπτει ότι:

$$\frac{f_{\text{cons}} A}{a} = \frac{f_{\text{cons}} B}{b} = \frac{f_{\text{gen}} C}{c} = \frac{f_{\text{gen}} D}{d}$$

Και αν γνωρίζουμε f_{0A} και $f_{\text{final}A}$:

Βαθμός Προόδου Αντίδρασης

Θυμίζουμε ότι για τη χημική αντίδραση



από τη *στοιχειομετρία* προκύπτει ότι:

$$\frac{f_{\text{cons } A}}{a} = \frac{f_{\text{cons } B}}{b} = \frac{f_{\text{gen } C}}{c} = \frac{f_{\text{gen } D}}{d}$$

Και αν γνωρίζουμε f_{OA} και f_{finalA} :

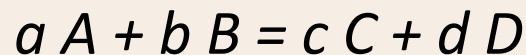
$$f_{\text{cons } A} = f_{OA} - f_{\text{final } A}$$

$$f_{\text{cons } B} = f_{OB} - f_{\text{final } B}$$

$$f_{\text{gen } C} = f_{\text{final } C} - f_{OC}$$

$$f_{\text{gen } D} = f_{\text{final } D} - f_{OD}$$

Βαθμός Προόδου Αντίδρασης



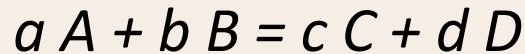
Αν ονομάσουμε το λόγο:

$$\frac{f_{\text{cons}} A}{a} = \frac{f_{\text{cons}} B}{b} = \frac{f_{\text{gen}} C}{c} = \frac{f_{\text{gen}} D}{d} = \xi$$

Βαθμό Προόδου, ξ

Τότε μπορούμε να διευκολυνθούμε πολύ στους υπολογισμούς των ποσοτήτων των τελικών προϊόντων μιας χημικής αντίδρασης

Βαθμός Προόδου Αντίδρασης



$$\frac{f_{\text{cons } A}}{a} = \frac{f_{\text{cons } B}}{b} = \frac{f_{\text{gen } C}}{c} = \frac{f_{\text{gen } D}}{d} = \xi$$

Βαθμός Προόδου, ξ

Η παραπάνω εξίσωση γράφεται:

$$\frac{f_{oA} - f_{\text{final } A}}{a} = \frac{f_{oB} - f_{\text{final } B}}{b} = \frac{f_{\text{final } C} - f_{oC}}{c} = \frac{f_{\text{final } D} - f_{oD}}{d} = \xi$$

Αναδιατάσσοντας τους όρους για λόγους ομοιογένειας έχουμε ότι:

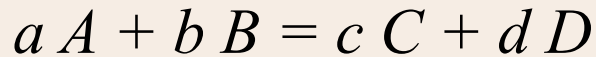
$$f_{\text{cons } A} = f_{oA} - f_{\text{final } A}$$

$$f_{\text{cons } B} = f_{oB} - f_{\text{final } B}$$

$$f_{\text{gen } C} = f_{\text{final } C} - f_{oC}$$

$$f_{\text{gen } D} = f_{\text{final } D} - f_{oD}$$

Βαθμός Προόδου Αντίδρασης

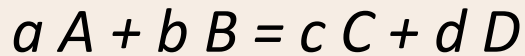


Βαθμός Προόδου, ξ

$$\frac{f_{final A} - f_{OA}}{-a} = \frac{f_{final B} - f_{OB}}{-b} = \frac{f_{final C} - f_{OC}}{c} = \frac{f_{final D} - f_{OD}}{d} = \xi$$

Και επομένως οι ποσότητες των τελικών προϊόντων μπορούν να υπολογιστούν από τις εξισώσεις:

Βαθμός Προόδου Αντίδρασης



Βαθμός Προόδου, ξ

$$f_{finalA} = f_{oA} - a\xi$$

$$f_{finalB} = f_{oB} - b\xi$$

$$f_{finalC} = f_{oC} + c\xi$$

$$f_{finalD} = f_{oD} + d\xi$$

Και αντί των παραγόντων ρυθμού παραγωγής
και κατανάλωσης
(f_{cons} και f_{gen})

στις εξισώσεις έχουμε μόνο το βαθμό
προόδου ξ , και τους στοιχειομετρικούς
συντελεστές της αντίδρασης a, b, c, d

Και από τις εξισώσεις αυτές υπολογίζονται οι τελικές ποσότητες όλων
των συστατικών που συμμετέχουν στην αντίδραση.

Βαθμός Προόδου Αντίδρασης

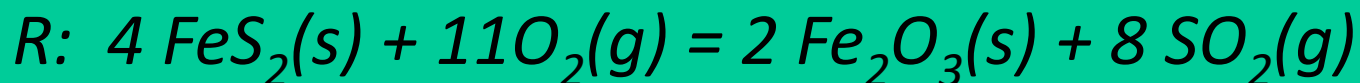
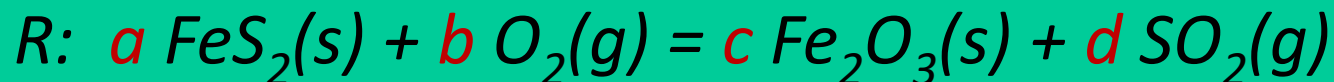
Γενικεύοντας, για μια οποιαδήποτε αντίδραση στην οποία συμμετέχουν A_j συστατικά με στοιχειομετρικούς συντελεστές α_j και βαθμό προόδου ξ έχουμε ότι:

$$f_{final A_j} = f_{o A_j} + \alpha_j \xi$$

α_j είναι αρνητικοί όταν αναφέρονται στα αντιδρώντα
 α_j είναι θετικοί όταν αναφέρονται στα προϊόντα

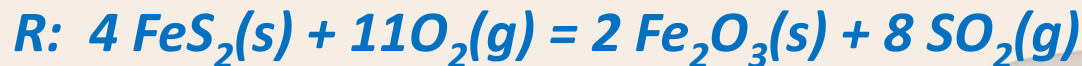
Παράδειγμα 1: Βαθμός Προόδου

Χημική αντίδραση φρύξης σιδηροπυρίτη $\text{FeS}_2(\text{s})$



Παράδειγμα 1: Βαθμός Προόδου

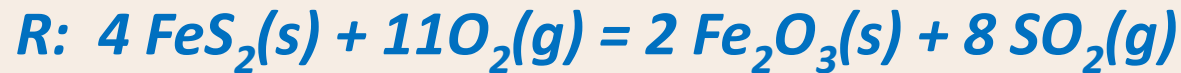
0.83 kmol σιδηροπυρίτη FeS_2 και **5 kmol** O_2 οξειδώνονται σε ατμόσφαιρα καθαρού οξυγόνου σύμφωνα με τη χημική αντίδραση:



Αν μετά το τέλος της αντίδρασης έχουν παραμείνει **0.04 kmol** FeS_2 που **δεν έχουν οξειδωθεί**, να κατασκευαστεί ένα **σχηματικό διάγραμμα** που να δείχνει παραστατικά την αρχική και την τελική κατάσταση του συστήματος και να βρεθούν:

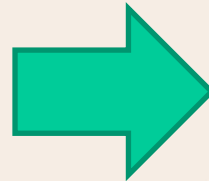
- α) ο **βαθμός προόδου** της χημικής αντίδρασης.
- β) η **ποσότητα του οξυγόνου που καταναλώθηκε** για να πραγματοποιηθεί η οξείδωση καθώς και οι **ποσότητες των προϊόντων** που σχηματίστηκαν.

Παράδειγμα 1: Βαθμός Προόδου



$$\begin{aligned} f_{o\text{FeS}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{o\text{O}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{o\text{Fe}_2\text{O}_3} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{o\text{SO}_2} &= ??? \text{ kmol} \end{aligned}$$

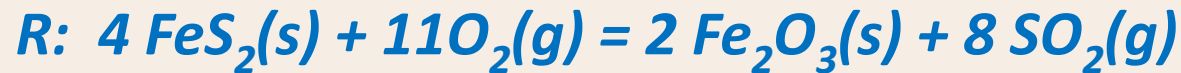
Αρχική κατάσταση



$$\begin{aligned} f_{final\text{FeS}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{final\text{O}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{final\text{Fe}_2\text{O}_3} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{final\text{SO}_2} &= ??? \text{ kmol} \end{aligned}$$

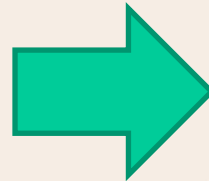
Τελική κατάσταση

Παράδειγμα 1: Βαθμός Προόδου



$$\begin{aligned} f_{o\text{FeS}_2} &= 0.83 \text{ kmol} \\ f_{o\text{O}_2} &= 5.00 \text{ kmol} \\ f_{o\text{Fe}_2\text{O}_3} &= 0.00 \text{ kmol} \\ f_{o\text{SO}_2} &= 0.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$

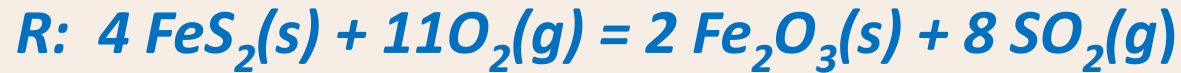
Αρχική κατάσταση



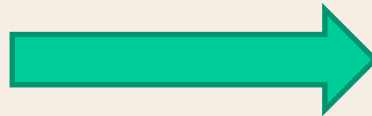
$$\begin{aligned} f_{final\text{FeS}_2} &= 0.04 \text{ kmol} \\ f_{final\text{O}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{final\text{Fe}_2\text{O}_3} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{final\text{SO}_2} &= ??? \text{ kmol} \end{aligned}$$

Τελική κατάσταση

Παράδειγμα 1: Βαθμός Προόδου

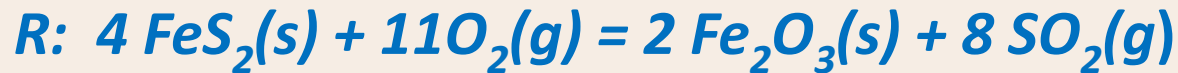


$$\begin{aligned} f_{\text{OFeS}_2} &= 0.83 \text{ kmol} \\ f_{\text{OO}_2} &= 5.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{OFe}_2\text{O}_3} &= 0.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{OSO}_2} &= 0.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$

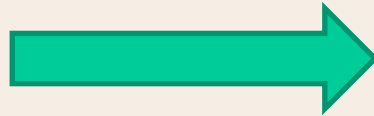


$$\begin{aligned} f_{\text{finalFeS}_2} &= 0.04 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalO}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{finalFe}_2\text{O}_3} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{finalSO}_2} &= ??? \text{ kmol} \end{aligned}$$

Παράδειγμα 1: Βαθμός Προόδου



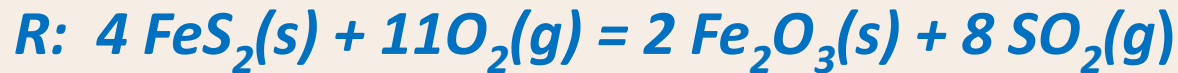
$$\begin{aligned} f_{\text{OFeS}_2} &= 0.83 \text{ kmol} \\ f_{\text{O}_2} &= 5.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{OFe}_2\text{O}_3} &= 0.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{OSO}_2} &= 0.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$



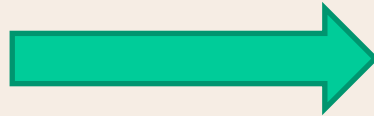
$$\begin{aligned} f_{\text{finalFeS}_2} &= 0.04 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalO}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{finalFe}_2\text{O}_3} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{finalSO}_2} &= ??? \text{ kmol} \end{aligned}$$

$$\frac{f_{\text{cons FeS}_2}}{4} = \frac{f_{\text{cons O}_2}}{11} = \frac{f_{\text{gen Fe}_2\text{O}_3}}{2} = \frac{f_{\text{gen SO}_2}}{8} = \xi$$

Παράδειγμα 1: Βαθμός Προόδου



$$\begin{aligned} f_{\text{OFeS}_2} &= 0.83 \text{ kmol} \\ f_{\text{OO}_2} &= 5.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{OFe}_2\text{O}_3} &= 0.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{OSO}_2} &= 0.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$



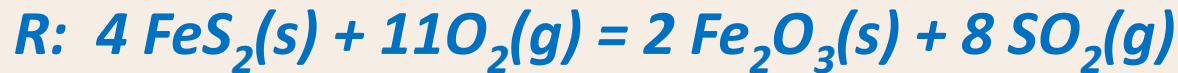
$$\begin{aligned} f_{\text{finalFeS}_2} &= 0.04 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalO}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{finalFe}_2\text{O}_3} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{finalSO}_2} &= ??? \text{ kmol} \end{aligned}$$

$$\frac{f_{\text{cons FeS}_2}}{4} = \frac{f_{\text{cons O}_2}}{11} = \frac{f_{\text{gen Fe}_2\text{O}_3}}{2} = \frac{f_{\text{gen SO}_2}}{8} = \xi$$

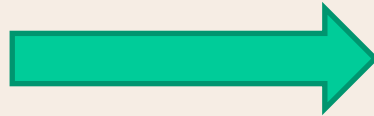
$$f_{\text{cons FeS}_2} = f_{\text{OFeS}_2} - f_{\text{finalFeS}_2} = 4 \xi$$

$$\xi = \frac{f_{\text{OFeS}_2} - f_{\text{finalFeS}_2}}{4} = \frac{0.83 \text{ kmol} - 0.04 \text{ kmol}}{4} = 0.1975 \text{ kmol}$$

Παράδειγμα 1: Βαθμός Προόδου



$$\begin{aligned} f_{\text{OFeS}_2} &= 0.83 \text{ kmol} \\ f_{\text{O}_2} &= 5.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{OFe}_2\text{O}_3} &= 0.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{OSO}_2} &= 0.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} f_{\text{finalFeS}_2} &= 0.04 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalO}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{finalFe}_2\text{O}_3} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{finalSO}_2} &= ??? \text{ kmol} \end{aligned}$$

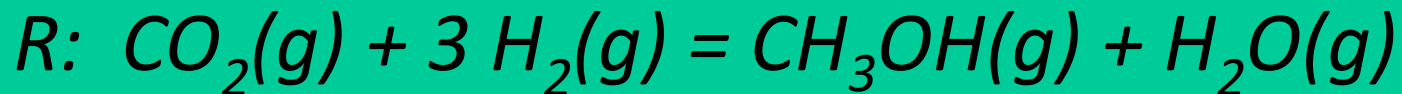
$$f_{\text{finalO}_2} = f_{\text{O}_2} - \alpha_{\text{O}_2} \xi = 5 \text{ kmol} - 11 \times 0.1975 \text{ kmol} = 2.857 \text{ kmol}$$

$$f_{\text{finalFe}_2\text{O}_3} = f_{\text{OFe}_2\text{O}_3} + \alpha_{\text{Fe}_2\text{O}_3} \xi = 0 \text{ kmol} + 2 \times 0.1975 \text{ kmol} = 0.395 \text{ kmol}$$

$$f_{\text{finalSO}_2} = f_{\text{OSO}_2} + \alpha_{\text{SO}_2} \xi = 0 \text{ kmol} + 8 \times 0.1975 \text{ kmol} = 1.580 \text{ kmol}$$

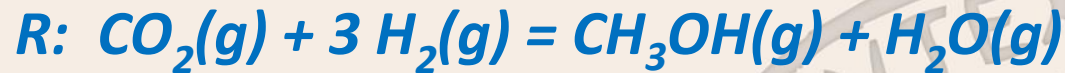
Παράδειγμα 2: Βαθμός Προόδου

Χημική αντίδραση παραγωγής μεθανόλης



Παράδειγμα 2: Βαθμός Προόδου

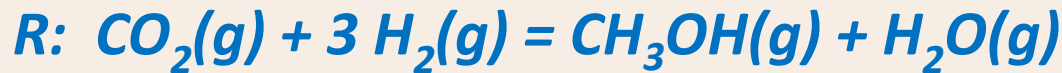
100 kmol διοξειδίου του άνθρακα αντιδρούν με 250 kmol υδρογόνου για το σχηματισμό μεθανόλης σύμφωνα με την χημική αντίδραση:



Από την αντίδραση παράγονται 80 kmol μεθανόλης να κατασκευαστεί ένα **σχηματικό διάγραμμα** που να δείχνει παραστατικά την αρχική και την τελική κατάσταση του συστήματος και να βρεθούν:

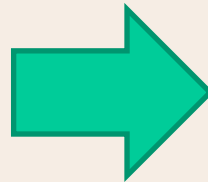
- α) ο **βαθμός προόδου** της χημικής αντίδρασης
- β) οι **ποσότητες των προϊόντων** που σχηματίστηκαν.

Παράδειγμα 2: Βαθμός Προόδου



$$\begin{aligned} f_{o\text{CO}_2} &= 100 \text{ kmol} \\ f_{o\text{H}_2} &= 250 \text{ kmol} \\ f_{o\text{CH}_3\text{OH}} &= 0.00 \text{ kmol} \\ f_{o\text{H}_2\text{O}} &= 0.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$

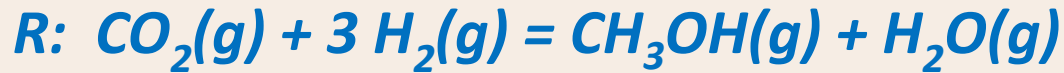
Αρχική κατάσταση



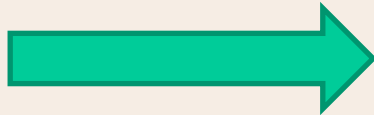
$$\begin{aligned} f_{final\text{CO}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{final\text{H}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{final\text{CH}_3\text{OH}} &= 80.00 \text{ kmol} \\ f_{final\text{H}_2\text{O}} &= ??? \text{ kmol} \end{aligned}$$

Τελική κατάσταση

Παράδειγμα 2: Βαθμός Προόδου

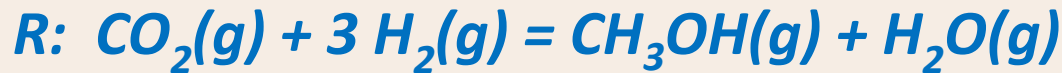


$$\begin{aligned} f_{\text{O}\text{CO}_2} &= 100 \text{ kmol} \\ f_{\text{O}\text{H}_2} &= 250 \text{ kmol} \\ f_{\text{O}\text{CH}_3\text{OH}} &= 0.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{O}\text{H}_2\text{O}} &= 0.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$

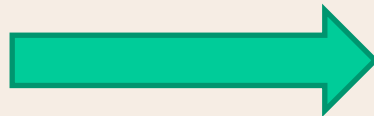


$$\begin{aligned} f_{\text{final}\text{CO}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{final}\text{H}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{final}\text{CH}_3\text{OH}} &= 80.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{final}\text{H}_2\text{O}} &= ??? \text{ kmol} \end{aligned}$$

Παράδειγμα 2: Βαθμός Προόδου



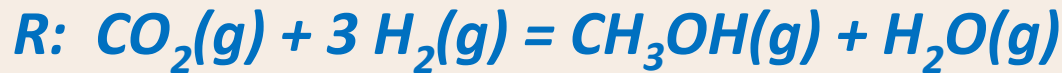
$$\begin{aligned} f_{o\text{CO}_2} &= 100 \text{ kmol} \\ f_{o\text{H}_2} &= 250 \text{ kmol} \\ f_{o\text{CH}_3\text{OH}} &= 0.00 \text{ kmol} \\ f_{o\text{H}_2\text{O}} &= 0.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$



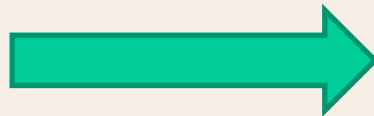
$$\begin{aligned} f_{\text{finalCO}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{finalH}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{finalCH}_3\text{OH}} &= 80.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalH}_2\text{O}} &= ??? \text{ kmol} \end{aligned}$$

$$\frac{f_{\text{cons CO}_2}}{1} = \frac{f_{\text{cons H}_2}}{3} = \frac{f_{\text{gen CH}_3\text{OH}}}{1} = \frac{f_{\text{gen H}_2\text{O}}}{1} = \zeta$$

Παράδειγμα 2: Βαθμός Προόδου



$$\begin{aligned} f_{o\text{CO}_2} &= 100 \text{ kmol} \\ f_{o\text{H}_2} &= 250 \text{ kmol} \\ f_{o\text{CH}_3\text{OH}} &= 0.00 \text{ kmol} \\ f_{o\text{H}_2\text{O}} &= 0.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$



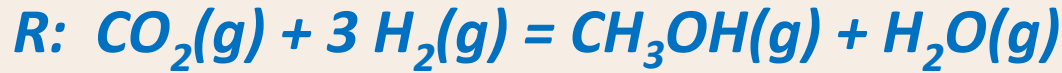
$$\begin{aligned} f_{\text{finalCO}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{finalH}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{finalCH}_3\text{OH}} &= 80.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalH}_2\text{O}} &= ??? \text{ kmol} \end{aligned}$$

$$\frac{f_{\text{cons CO}_2}}{1} = \frac{f_{\text{cons H}_2}}{3} = \frac{f_{\text{gen CH}_3\text{OH}}}{1} = \frac{f_{\text{gen H}_2\text{O}}}{1} = \xi$$

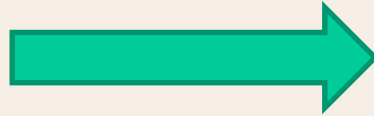
$$f_{\text{genCH}_3\text{OH}} = f_{\text{finalCH}_3\text{OH}} - f_{o\text{CH}_3\text{OH}} = 1 \xi$$

$$\xi = \frac{f_{\text{finalCH}_3\text{OH}} - f_{o\text{CH}_3\text{OH}}}{1} = \frac{80 \text{ kmol} - 0.00 \text{ kmol}}{1} = 80 \text{ kmol}$$

Παράδειγμα 2: Βαθμός Προόδου



$$\begin{aligned} f_{o\text{CO}_2} &= 100 \text{ kmol} \\ f_{o\text{H}_2} &= 250 \text{ kmol} \\ f_{o\text{CH}_3\text{OH}} &= 0.00 \text{ kmol} \\ f_{o\text{H}_2\text{O}} &= 0.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} f_{\text{finalCO}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{finalH}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{finalCH}_3\text{OH}} &= 80.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalH}_2\text{O}} &= ??? \text{ kmol} \end{aligned}$$

$$f_{\text{finalCO}_2} = f_{o\text{CO}_2} + \alpha_{\text{CO}_2} \xi = 100 \text{ kmol} - 1 \times 80 \text{ kmol} = 20 \text{ kmol}$$

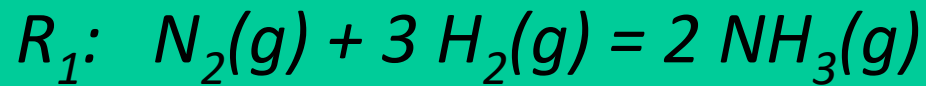
$$f_{\text{finalH}_2} = f_{o\text{H}_2} + \alpha_{\text{H}_2} \xi = 250 \text{ kmol} - 3 \times 80 \text{ kmol} = 10 \text{ kmol}$$

$$f_{\text{finalCH}_3\text{OH}} = f_{o\text{CH}_3\text{OH}} + \alpha_{\text{CH}_3\text{OH}} \xi = 0 \text{ kmol} + 1 \times 80 \text{ kmol} = 80 \text{ kmol}$$

$$f_{\text{finalH}_2\text{O}} = f_{o\text{H}_2\text{O}} + \alpha_{\text{H}_2\text{O}} \xi = 0 \text{ kmol} + 1 \times 80 \text{ kmol} = 80 \text{ kmol}$$

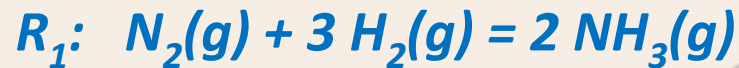
Παράδειγμα 3: Βαθμός Προόδου

Χημική αντίδραση παραγωγής αμμωνίας



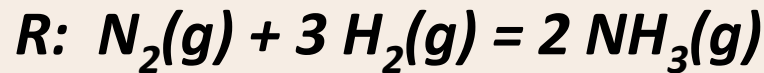
Παράδειγμα 3: Βαθμός Προόδου

Σε έναν αντιδραστήρα πραγματοποιείται σύνθεση αμμωνίας από άζωτο και υδρογόνο, σύμφωνα με την αντίδραση:



Αν η τροφοδοσία του αντιδραστήρα αποτελείται από **1 L $NH_3(g)$** , **30 L $N_2(g)$** και **110 L $H_2(g)$** και γνωρίζοντας ότι κατά τη διάρκεια της αντίδρασης **καταναλώνεται όλη η ποσότητα του τροφοδοτούμενου αζώτου** να προσδιοριστούν οι **τελικές ποσότητες των συστατικών μετά το πέρας της αντίδρασης**.

Παράδειγμα 3: Βαθμός Προόδου



$$\begin{aligned} f_{ON_2} &= 1.339 \text{ mol} \\ f_{OH_2} &= 4.910 \text{ mol} \\ f_{ONH_3} &= 0.044 \text{ mol} \end{aligned}$$

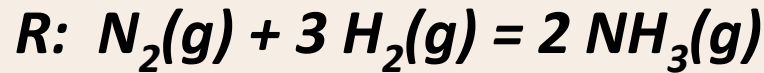
Αρχική κατάσταση



$$\begin{aligned} f_{finalN_2} &= 0 \text{ mol} \\ f_{finalH_2} &= ??? \text{ mol} \\ f_{finalNH_3} &= ??? \text{ mol} \end{aligned}$$

Τελική κατάσταση

Παράδειγμα 3: Βαθμός Προόδου

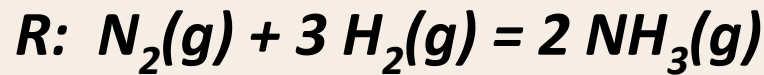


$$\begin{aligned} f_{ON_2} &= 1.339 \text{ mol} \\ f_{OH_2} &= 4.910 \text{ mol} \\ f_{ONH_3} &= 0.044 \text{ mol} \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} f_{finalN_2} &= 0 \text{ mol} \\ f_{finalH_2} &= ??? \text{ mol} \\ f_{finalNH_3} &= ??? \text{ mol} \end{aligned}$$

Παράδειγμα 3: Βαθμός Προόδου



$$\begin{aligned} f_{ON_2} &= 1.339 \text{ mol} \\ f_{OH_2} &= 4.910 \text{ mol} \\ f_{ONH_3} &= 0.044 \text{ mol} \end{aligned}$$



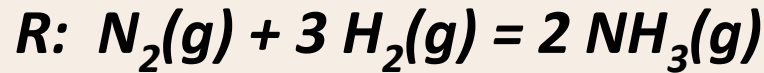
$$\begin{aligned} f_{finalN_2} &= 0 \text{ mol} \\ f_{finalH_2} &= ??? \text{ mol} \\ f_{finalNH_3} &= ??? \text{ mol} \end{aligned}$$

$$\frac{f_{cons} N_2}{1} = \frac{f_{cons} H_2}{3}$$

Συνεπώς, $f_{cons} H_2 = 3f_{cons} N_2 = 3 \times 1.339 \text{ mol } N_2 = 4.017 \text{ mol } H_2$

Στο σύστημα υπάρχουν 4.910 mol H_2 . Το N_2 θα καταναλωθεί πλήρως ενώ θα περισσέψει H_2 .

Παράδειγμα 3: Βαθμός Προόδου



Εξ ορισμού: $\frac{f_{\text{cons}} N_2}{1} = \frac{f_{\text{cons}} H_2}{3} = \frac{f_{\text{gen}} NH_3}{2} = \xi$

$$\xi = f_{\text{cons}} N_2 = f_{O N_2} - f_{\text{final}} N_2 = f_{O N_2} = 1.339 \text{ mol}$$

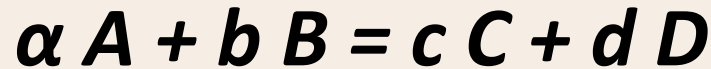
$$f_{\text{final}} H_2 = f_{O H_2} - a_{H_2} \xi = 4.91 \text{ mol} - 3 \times 1.339 \text{ mol} = 0.839 \text{ mol}$$

$$f_{\text{final}} NH_3 = f_{O NH_3} + a_{NH_3} \xi = 0.44 \text{ mol} + 2 \times 1.339 \text{ mol} = 2.722 \text{ mol}$$

Βαθμός Μετατροπής αντιδρώντων

**Τι είναι ο βαθμός μετατροπής
ενός αντιδρώντος
σε μια χημική αντίδραση;**

Βαθμός Μετατροπής αντιδρώντων



Ο **βαθμός μετατροπής**, συμβολίζεται με το γράμμα ***x***, έχει νόημα μόνο για τα αντιδρώντα συστατικά, και εκφράζει το ποσοστό ή το κλάσμα των αντιδρώντων που μετατρέπεται κατά τη διάρκεια της χημικής αντίδρασης σε προϊόντα.

$$x_A = \frac{\text{moles } A \text{ καταναλώθηκαν}}{\text{αρχικά moles } A} = \frac{f_{\text{cons}A}}{f_{0A}} = \frac{f_{0A} - f_{\text{final}A}}{f_{0A}}$$

Βαθμός Μετατροπής αντιδρώντων

Ο **βαθμός μετατροπής**, εκφράζει το ποσοστό ή το κλάσμα των αντιδρώντων που μετατρέπεται κατά τη διάρκεια της χημικής αντίδρασης σε προϊόντα.

$$x_A = \frac{\text{moles } A \text{ καταναλώθηκαν}}{\text{αρχικά moles } A} = \frac{f_{\text{cons}A}}{f_{OA}} = \frac{f_{OA} - f_{\text{final } A}}{f_{OA}}$$

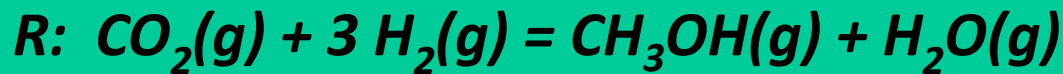
Μπορεί να υπολογιστεί από το **βαθμό προόδου** της χημικής αντίδρασης σύμφωνα με:

$$\frac{f_{OA} - f_{\text{final } A}}{a} = \xi$$

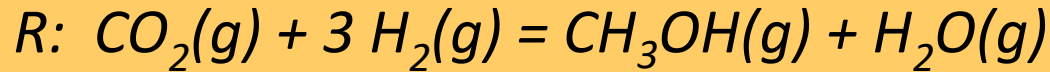
$$x_A = \frac{a\xi}{f_{OA}} \text{ αλλιώς } \xi = \frac{x_A f_{OA}}{a}$$

Παράδειγμα 4: Βαθμός Μετατροπής

Υπολογισμός βαθμού μετατροπής $\text{CO}_2(\text{g})$ στη χημική αντίδραση παραγωγής μεθανόλης:

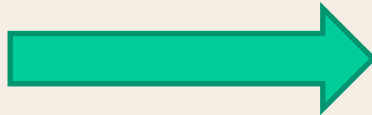


Παράδειγμα 4: Βαθμός Μετατροπής



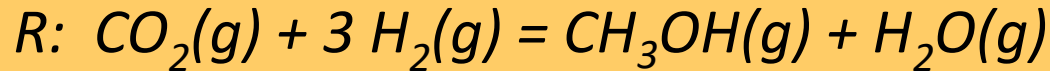
$$\begin{aligned} f_{\text{O}\text{CO}_2} &= 100 \text{ kmol} \\ f_{\text{O}\text{H}_2} &= 250 \text{ kmol} \\ f_{\text{O}\text{CH}_3\text{OH}} &= 0.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{O}\text{H}_2\text{O}} &= 0.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$

$$\xi = 80 \text{ kmol}$$



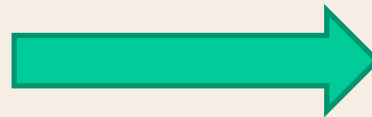
$$\begin{aligned} f_{\text{final}\text{CO}_2} &= 20.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{final}\text{H}_2} &= 10.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{final}\text{CH}_3\text{OH}} &= 80.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{final}\text{H}_2\text{O}} &= 80.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$

Παράδειγμα 4: Βαθμός Μετατροπής



$$\begin{aligned} f_{o\text{CO}_2} &= 100 \text{ kmol} \\ f_{o\text{H}_2} &= 250 \text{ kmol} \\ f_{o\text{CH}_3\text{OH}} &= 0.00 \text{ kmol} \\ f_{o\text{H}_2\text{O}} &= 0.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$

$$\xi = 80 \text{ kmol}$$

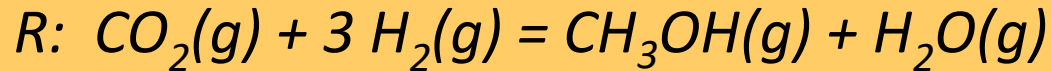


$$\begin{aligned} f_{\text{finalCO}_2} &= 20.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalH}_2} &= 10.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalCH}_3\text{OH}} &= 80.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalH}_2\text{O}} &= 80.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$

$$x_{\text{CO}_2} = \frac{\text{moles CO}_2 \text{ καταναλώθηκαν}}{\text{αρχικά moles CO}_2} = \frac{f_{\text{consCO}_2}}{f_{o\text{CO}_2}} = \frac{f_{o\text{CO}_2} - f_{\text{final CO}_2}}{f_{o\text{CO}_2}}$$

$$x_{\text{CO}_2} = \frac{f_{o\text{CO}_2} - f_{\text{final CO}_2}}{f_{o\text{CO}_2}} = \frac{100\text{kmol} - 20\text{kmol}}{100 \text{ kmol}} = 0.80 \text{ η } 80\%$$

Παράδειγμα 4: Βαθμός Μετατροπής



$$\begin{aligned} f_{o\text{CO}_2} &= 100 \text{ kmol} \\ f_{o\text{H}_2} &= 250 \text{ kmol} \\ f_{o\text{CH}_3\text{OH}} &= 0.00 \text{ kmol} \\ f_{o\text{H}_2\text{O}} &= 0.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$

$$\xi = 80 \text{ kmol}$$



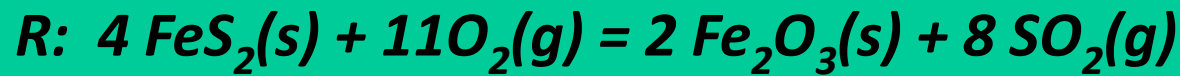
$$\begin{aligned} f_{\text{finalCO}_2} &= 20.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalH}_2} &= 10.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalCH}_3\text{OH}} &= 80.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalH}_2\text{O}} &= 80.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$

Το ίδιο αποτέλεσμα θα είχαμε αν υπολογίζαμε το βαθμό μετατροπής με βάση το βαθμό προόδου:

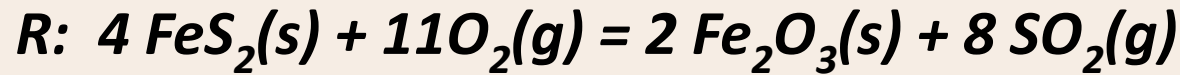
$$x_{\text{CO}_2} = \frac{\alpha \xi}{f_{o\text{CO}_2}} = \frac{1 \times 80 \text{ kmol}}{100 \text{ kmol}} = 0.80$$

Παράδειγμα 5: Βαθμός Μετατροπής

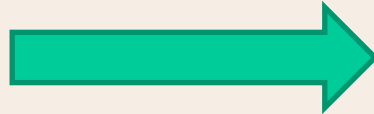
Υπολογισμός βαθμού μετατροπής $\text{FeS}_2(\text{s})$ στη χημική αντίδραση
φρύξης σιδηροπυρίτη $\text{FeS}_2(\text{s})$:



Παράδειγμα 5: Βαθμός Μετατροπής

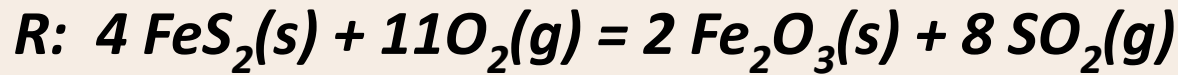


$$\begin{aligned} f_{\text{OFeS}_2} &= 0.83 \text{ kmol} \\ f_{\text{O}_2} &= 5.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{OFe}_2\text{O}_3} &= 0.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{OSO}_2} &= 0.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$

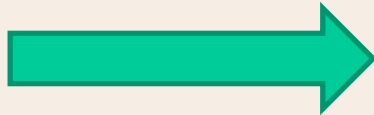


$$\begin{aligned} f_{\text{finalFeS}_2} &= 0.04 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalO}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{finalFe}_2\text{O}_3} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{finalSO}_2} &= ??? \text{ kmol} \end{aligned}$$

Παράδειγμα 5: Βαθμός Μετατροπής



$$\begin{aligned} f_{\text{OFeS}_2} &= 0.83 \text{ kmol} \\ f_{\text{O O}_2} &= 5.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{O Fe}_2\text{O}_3} &= 0.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{O SO}_2} &= 0.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$



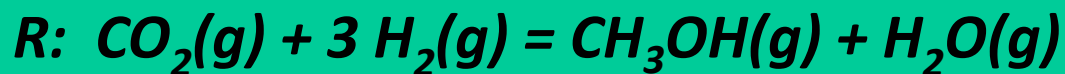
$$\begin{aligned} f_{\text{final FeS}_2} &= 0.04 \text{ kmol} \\ f_{\text{final O}_2} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{final Fe}_2\text{O}_3} &= ??? \text{ kmol} \\ f_{\text{final SO}_2} &= ??? \text{ kmol} \end{aligned}$$

$$x_{\text{FeS}_2} = \frac{\text{moles FeS}_2 \text{ καταναλώθηκαν}}{\text{αρχικά moles FeS}_2} = \frac{f_{\text{cons FeS}_2}}{f_{\text{O FeS}_2}} = \frac{f_{\text{O FeS}_2} - f_{\text{final FeS}_2}}{f_{\text{O FeS}_2}}$$

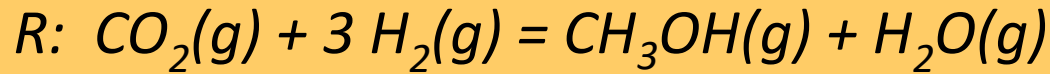
$$x_{\text{FeS}_2} = \frac{f_{\text{O FeS}_2} - f_{\text{final FeS}_2}}{f_{\text{O FeS}_2}} = \frac{0.83 \text{ kmol} - 0.04 \text{ kmol}}{0.83 \text{ kmol}} = 0.95 \text{ ή } 95\%$$

Παράδειγμα 6: Βαθμός Μετατροπής

Υπολογισμός βαθμού μετατροπής $H_2(g)$ στην χημική αντίδραση παραγωγής μεθανόλης:



Παράδειγμα 6: Βαθμός Μετατροπής



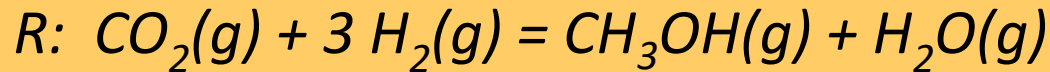
$$\begin{aligned} f_{o\text{CO}_2} &= 100 \text{ kmol} \\ f_{o\text{H}_2} &= 250 \text{ kmol} \\ f_{o\text{CH}_3\text{OH}} &= 0.00 \text{ kmol} \\ f_{o\text{H}_2\text{O}} &= 0.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$

$$\xi = 80 \text{ kmol}$$



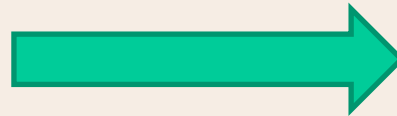
$$\begin{aligned} f_{\text{finalCO}_2} &= 20 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalH}_2} &= 10 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalCH}_3\text{OH}} &= 80 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalH}_2\text{O}} &= 80 \text{ kmol} \end{aligned}$$

Παράδειγμα 6: Βαθμός Μετατροπής



$$\begin{aligned} f_{o\text{CO}_2} &= 100 \text{ kmol} \\ f_{o\text{H}_2} &= 250 \text{ kmol} \\ f_{o\text{CH}_3\text{OH}} &= 0.00 \text{ kmol} \\ f_{o\text{H}_2\text{O}} &= 0.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$

$$\xi = 80 \text{ kmol}$$

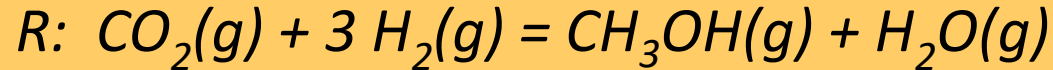


$$\begin{aligned} f_{\text{finalCO}_2} &= 20 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalH}_2} &= 10 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalCH}_3\text{OH}} &= 80 \text{ kmol} \\ f_{\text{finalH}_2\text{O}} &= 80 \text{ kmol} \end{aligned}$$

$$x_{\text{H}_2} = \frac{\text{moles H}_2 \text{ καταναλώθηκαν}}{\text{αρχικά moles H}_2} = \frac{f_{\text{consH}_2}}{f_{o\text{H}_2}} = \frac{f_{o\text{H}_2} - f_{\text{final H}_2}}{f_{o\text{H}_2}}$$

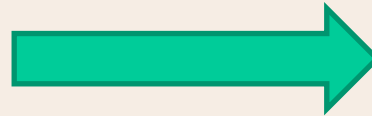
$$x_{\text{H}_2} = \frac{f_{o\text{H}_2} - f_{\text{final H}_2}}{f_{o\text{H}_2}} = \frac{250 \text{ kmol} - 10 \text{ kmol}}{250 \text{ kmol}} = 0.96 \text{ ή } 96\%$$

Παράδειγμα 6: Βαθμός Μετατροπής



$$\begin{aligned} f_{\text{O}\text{CO}_2} &= 100 \text{ kmol} \\ f_{\text{O}\text{H}_2} &= 250 \text{ kmol} \\ f_{\text{O}\text{CH}_3\text{OH}} &= 0.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{O}\text{H}_2\text{O}} &= 0.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$

$$\xi = 80 \text{ kmol}$$



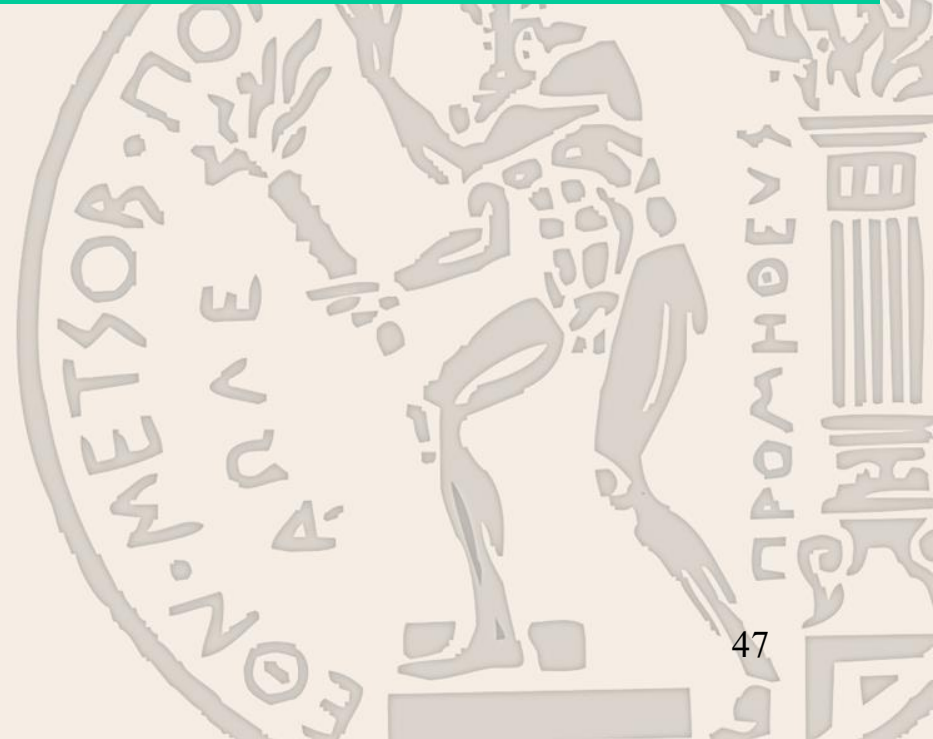
$$\begin{aligned} f_{\text{final}\text{CO}_2} &= 20.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{final}\text{H}_2} &= 10.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{final}\text{CH}_3\text{OH}} &= 80.00 \text{ kmol} \\ f_{\text{final}\text{H}_2\text{O}} &= 80.00 \text{ kmol} \end{aligned}$$

Το ίδιο αποτέλεσμα θα είχαμε αν υπολογίζαμε το βαθμό μετατροπής με βάση το βαθμό προϊόντος:

$$x_{\text{H}_2} = \frac{\alpha \xi}{f_{\text{O}\text{H}_2}} = \frac{3 \times 80 \text{ kmol}}{250 \text{ kmol}} = 0.96$$

Περιοριστικό αντιδρών - Αντιδρών σε περίσσεια

Τι είναι περιοριστικό αντιδρών και τι είναι αντιδρών σε περίσσεια;



Περιοριστικό αντιδρών - Αντιδρών σε περίσσεια

Σε μια χημική αντίδραση υπάρχουν δύο κατηγορίες αντιδρώντων συστατικών:

- αυτό που θα καταναλωθεί πλήρως αν ολοκληρωθεί τελείως η αντίδραση και ονομάζεται **περιοριστικό αντιδρών**
- και τα αντιδρώντα που θα περισσέψουν γιατί η ποσότητα τους είναι μεγαλύτερη από αυτή που απαιτείται στοιχειομετρικά για να ολοκληρωθεί η αντίδραση και ονομάζονται **αντιδρώντα σε περίσσεια**

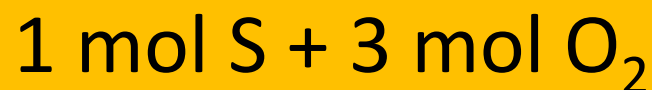
Περιοριστικό αντιδρών - Αντιδρών σε περίσσεια

Περιοριστικό αντιδρών: καταναλώνεται πλήρως

Αντιδρών σε περίσσεια: δεν καταναλώνεται πλήρως



Στο σύστημα έχουμε:



Αντιδρούν:

Περίσσεια:

Περιοριστικό αντιδρών - Αντιδρών σε περίσσεια

Περιοριστικό αντιδρών: καταναλώνεται πλήρως

Αντιδρών σε περίσσεια: δεν καταναλώνεται πλήρως



Στο σύστημα έχουμε:



Αντιδρούν:



Περίσσεια:

Περιοριστικό αντιδρών - Αντιδρών σε περίσσεια

Περιοριστικό αντιδρών: καταναλώνεται πλήρως

Αντιδρών σε περίσσεια: δεν καταναλώνεται πλήρως



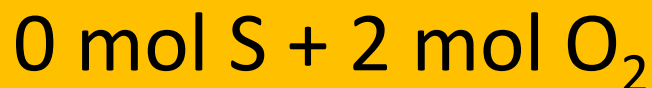
Στο σύστημα έχουμε:



Αντιδρούν:



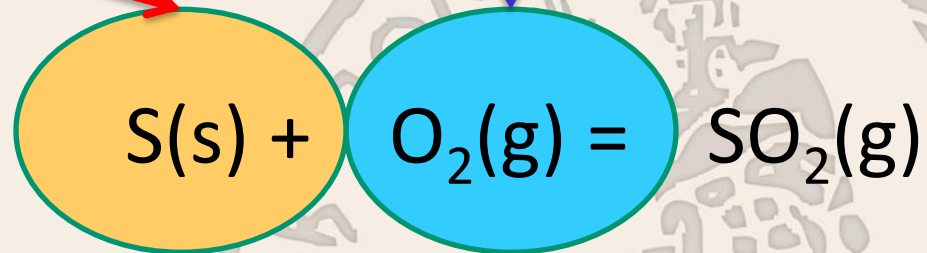
Περίσσεια:



Περιοριστικό αντιδρών - Αντιδρών σε περίσσεια

Περιοριστικό
Αντιδρών

Αντιδρών
σε περίσσεια



Στο σύστημα έχουμε

Αντιδρούν

Περίσσεια

1 mol S + 3 mol O₂

1 mol S + 1 mol O₂

0 mol S + 2 mol O₂

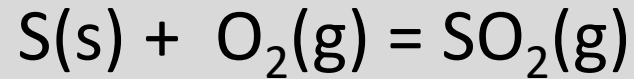
Περιοριστικό αντιδρών

Πως μπορούμε να προσδιορίσουμε ποιο είναι το περιοριστικό αντιδρών;

Το περιοριστικό αντιδρών σε μια χημική αντίδραση που συμμετέχουν πολλά αντιδρώντα, είναι αυτό για το οποίο ισχύει η συνθήκη:

$$\frac{f_{O_{A_j}}}{a_j} = \textit{minimum}$$

Περιοριστικό αντιδρών



Χρησιμοποιούνται

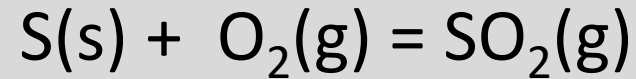


$$\text{S} : \frac{f_{\text{O}_\text{S}}}{a_\text{S}} = \frac{1 \text{ mol}}{1} = 1 \text{ mol}$$

$$\text{O}_2 : \frac{f_{\text{O}_{\text{O}_2}}}{a_{\text{O}_2}} = \frac{3 \text{ mol}}{1} = 3 \text{ mol}$$

$$\text{Minimum} \left[\frac{f_{\text{O}_\text{S}}}{a_\text{S}}, \frac{f_{\text{O}_{\text{O}_2}}}{a_{\text{O}_2}} \right] = \frac{f_{\text{O}_\text{S}}}{a_\text{S}} = 1 \text{ mol}$$

Περιοριστικό αντιδρών



Χρησιμοποιούνται



$$\text{Minimum } \left[\frac{f_{\text{O}_2}}{a_{\text{O}_2}}, \frac{f_{\text{S}}}{a_{\text{S}}} \right] = \frac{f_{\text{S}}}{a_{\text{S}}} = 1 \text{ mol}$$

- Το S(s) είναι το περιοριστικό αντιδρών
- Το O₂(g) είναι σε περίσσεια

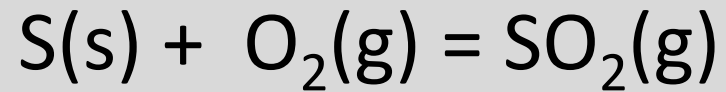
Περίσσεια αντιδρώντος

Η περίσσεια ενός αντιδρώντος (α) εκφράζει την **επιπλέον ποσότητα του υλικού** αυτού, πέραν από αυτήν που απαιτείται για να αντιδράσει στοιχειομετρικά με το περιοριστικό αντιδρών

$$a_A = \frac{f_{OA} - f_{stoichA}}{f_{stoichA}}$$

$$a_A(\%) = 100 \times \frac{f_{OA} - f_{stoichA}}{f_{stoichA}}$$

Περίσσεια αντιδρώντος



Χρησιμοποιούνται

$$1 \text{ mol} + 3 \text{ mol} = \text{????}$$

Αντιδρούν

$$1 \text{ mol} + 1 \text{ mol} = 1 \text{ mol}$$

Περίσσεια

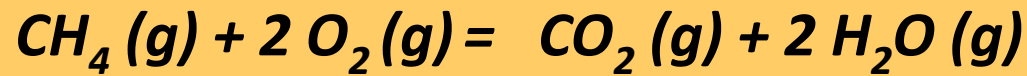
$$0 \text{ mol} + 2 \text{ mol} = \text{????}$$

$$a_A(\%) = 100 \times \frac{f_{\text{O}_2} - f_{\text{stoicho}_2}}{f_{\text{stoicho}_2}} = 100 \times \frac{3 \text{ mol O}_2 - 1 \text{ mol O}_2}{1 \text{ mol O}_2} = 200\%$$

Σημειώνουμε ότι **200% περίσσεια** σημαίνει ότι διαθέτουμε **3πλάσια ποσότητα** οξυγόνου από αυτή που απαιτείται στοιχειομετρικά

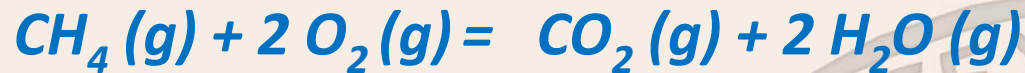
Περίσσεια αντιδρώντος

Περιοριστικό αντιδρών, αντιδρών σε περίσσεια, επί τοις εκατό
περίσσεια κατά την καύση μεθανίου με αέρα



Παράδειγμα 7: Περίσσεια αντιδρώντος

Σε έναν καυστήρα καίγονται **10 mol/h CH₄** με **80 mol/h αέρα** σύμφωνα με τη χημική αντίδραση:



Να βρεθούν:

- το περιοριστικό αντιδρών
- το αντιδρών συστατικό που είναι σε περίσσεια
- η επί τοις εκατό περίσσεια

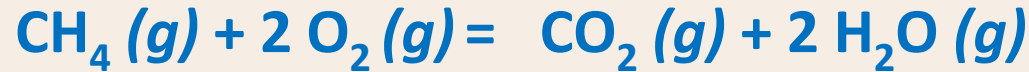
Παράδειγμα 7: Περίσσεια αντιδρώντος

Το περιοριστικό αντιδρών σε μια χημική αντίδραση που συμμετέχουν πολλά αντιδρώντα είναι αυτό για το οποίο ισχύει η συνθήκη:

$$\frac{f_{O_{Aj}}}{a} = \textit{minimum}$$

Δηλαδή στη συγκεκριμένη περίπτωση έχουμε:

Παράδειγμα 7: Περίσσεια αντιδρώντος



$$f_{\text{OCH}_4} = 10 \text{ mol}$$

$$f_{\text{O αερα}} = 80 \text{ mol}$$

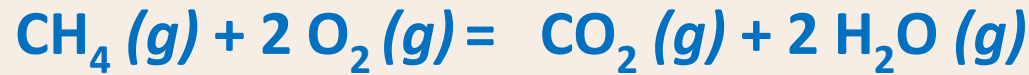
$$f_{\text{O O}_2} = ??? \text{ mol}$$

$$a_{\text{CH}_4} = 1$$

$$a_{\text{O}_2} = 2$$



Παράδειγμα 7: Περίσσεια αντιδρώντος



$$f_{\text{OCH}_4} = 10 \text{ mol}$$

$$f_{\text{O}_2} = 0.21 \times 80 \text{ mol} = 16.8 \text{ mol}$$

$$a_{\text{CH}_4} = 1$$

$$a_{\text{O}_2} = 2$$

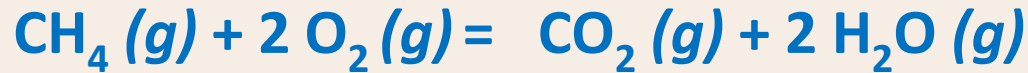
$$\frac{f_{\text{OCH}_4}}{a_{\text{CH}_4}} = \frac{10 \text{ mol}}{1} = 10 \text{ mol}$$

$$\frac{f_{\text{O}_2}}{a_{\text{O}_2}} = \frac{16.8 \text{ mol}}{2} = 8.4 \text{ mol}$$

$$\text{minimum} \left[\frac{f_{\text{OCH}_4}}{a_{\text{CH}_4}}, \frac{f_{\text{O}_2}}{a_{\text{O}_2}} \right] = \frac{f_{\text{O}_2}}{a_{\text{O}_2}} = 8.4 \text{ mol}$$

- Το $\text{O}_2(g)$ είναι το περιοριστικό αντιδρών
- Το $\text{CH}_4(g)$ είναι σε περίσσεια

Παράδειγμα 7: Περίσσεια αντιδρώντος



$$f_{\text{OCH}_4} = 10 \text{ mol}$$

$$f_{\text{OO}_2} = 0.21 \times 80 \text{ mol} = 16.8 \text{ mol}$$

$$a_{\text{CH}_4} = 1$$

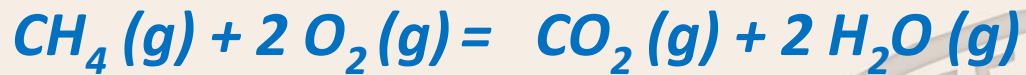
$$a_{\text{O}_2} = 2$$

Το $\text{O}_2(g)$ θα καταναλωθεί πλήρως ενώ θα περισσέψει άκαυστο $\text{CH}_4(g)$

Δεν είναι λογικό όμως να μην καταναλώνεται όλη η ποσότητα του χρήσιμου και ποιο ακριβού υλικού γι' αυτό καλό θα είναι να αυξήσουμε την ποσότητα του αέρα που τροφοδοτούμε

Παράδειγμα 8: Περίσσεια αντιδρώντος

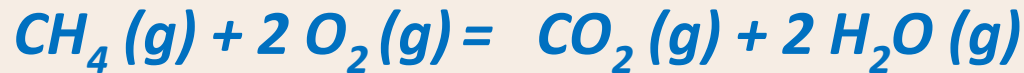
Στον καυστήρα τροφοδοτούνται τώρα **10 mol/h CH₄** και **200 mol/h αέρα** και καίγονται σύμφωνα με τη χημική αντίδραση:



Να βρεθούν:

- το περιοριστικό αντιδρών,
- το αντιδρών συστατικό που είναι σε περίσσεια,
- η επί τοις εκατό περίσσεια

Παράδειγμα 8: Περίσσεια αντιδρώντος



$$f_{\text{OCH}_4} = 10 \text{ mol}$$

$$f_{\text{O}_2} = 0.21 \times 200 \text{ mol} = 42 \text{ mol}$$

$$a_{\text{CH}_4} = 1$$

$$a_{\text{O}_2} = 2$$

$$\frac{f_{\text{OCH}_4}}{a_{\text{CH}_4}} = \frac{10 \text{ mol}}{1} = 10 \text{ mol}$$

$$\frac{f_{\text{O}_2}}{a_{\text{O}_2}} = \frac{42 \text{ mol}}{2} = 21 \text{ mol}$$

$$\text{minimum} \left[\frac{f_{\text{OCH}_4}}{a_{\text{CH}_4}}, \frac{f_{\text{O}_2}}{a_{\text{O}_2}} \right] = \frac{f_{\text{OCH}_4}}{a_{\text{CH}_4}} = 10 \text{ mol}$$

- Το $\text{CH}_4(g)$ είναι το περιοριστικό αντιδρών
- Το $\text{O}_2(g)$ είναι σε περίσσεια

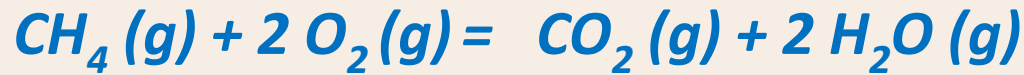
Παράδειγμα 8: Περίσσεια αντιδρώντος

Η **περίσσεια** ενός αντιδρώντος εκφράζει την επιπλέον ποσότητα του υλικού αυτού, **πέραν από αυτήν που απαιτείται για να αντιδράσει στοιχειομετρικά με το περιοριστικό αντιδρών.**

$$a_A = \frac{f_{OA} - f_{stoichA}}{f_{stoichA}}$$

$$a_A(\%) = 100 \times \frac{f_{OA} - f_{stoichA}}{f_{stoichA}}$$

Παράδειγμα 8: Περίσσεια αντιδρώντος



$$f_{\text{OCH}_4} = 10 \text{ mol}$$

$$f_{\text{O}_2} = 0.21 \times 200 \text{ mol} = 42 \text{ mol}$$

$$a_{\text{CH}_4} = 1$$

$$a_{\text{O}_2} = 2$$

$$\alpha_{\text{O}_2}(\%) = \frac{f_{\text{O}_2} - f_{\text{stoicho}_2}}{f_{\text{stoicho}_2}} = \frac{42 \text{ mol O}_2 - 20 \text{ mol O}_2}{20 \text{ mol O}_2} = 1,10 \text{ η } 110\%$$

$$\text{όπου: } f_{\text{stoicho}_2} = a_{\text{O}_2} \frac{f_{\text{OCH}_4}}{a_{\text{CH}_4}} = 2 \times \frac{10 \text{ mol}}{1} = 20 \text{ mol}$$