



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
Σχολή Χημικών Μηχανικών

Εισαγωγή στη Χημική Μηχανική

Ισοζύγια μάζας με αντίδραση

Επ. Καθ. Κυριάκος Λαμπρόπουλος

Βασικές έννοιες

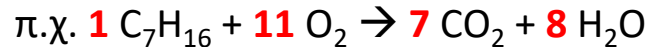
- ❖ Στοιχειομετρία
 - Στοιχειομετρικοί συντελεστές
 - Στοιχειομετρική αναλογία
- ❖ Μη στοιχειομετρική αναλογία
 - Περιοριστικό αντιδρών
 - Αντιδρών σε περίσσεια
- ❖ Μετατροπή (κλάσμα ή βαθμός μετατροπής)
- ❖ Απόδοση αντίδρασης
- ❖ Εκλεκτικότητα
- ❖ Έκταση αντίδρασης ξ

ΣΤΟΙΧΕΙΟΜΕΤΡΙΑ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗΣ

- Η στοιχειομετρία ασχολείται με τις ποσότητες των στοιχείων ή των ενώσεων που αντιδρούν και αυτών που παράγονται σε χημική αντίδραση
- Οι ποσοτικές πληροφορίες αναφέρονται σε **mol** και **όχι σε g**.
- **Μετατρέπουμε τη μάζα σε mol και εφαρμόζουμε τη στοιχειομετρία**



δηλ. a moles του A και b moles του B αντιδρούν μεταξύ τους
και παράγουν c moles του C και d moles του D



Στοιχειομετρικές ποσότητες: a, b, c, d

Στοιχειομετρικές αναλογίες: a/b, a/c, a/d, b/c, b/d, c/d

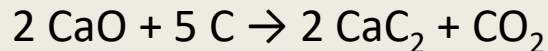
**Οι στοιχειομετρικοί συντελεστές συστατικών είναι αρνητικοί για αντιδρώντα
και θετικοί για προϊόντα**

ΣΤΟΙΧΕΙΟΜΕΤΡΙΑ – ΜΕΤΑΤΡΟΠΗ ΣΕ MOLES

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 1



Το καρβίδιο του ασβεστίου (CaC_2) παρασκευάζεται κατά τη θέρμανση οξειδίου του ασβεστίου (CaO) και άνθρακα (C) σε υψηλή θερμοκρασία.



Διατίθενται 1150 kg CaO . Πόσα kg C απαιτούνται για την πλήρη αντίδραση του CaO και πόσα kg CaC_2 θα παραχθούν;

MB: CaO 56, CaC_2 64

Hint:

- *Don't panic, υπάρχουν και πιο δύσκολα πράγματα στη ζωή*
- *Ξαναδείτε την αντίδραση, 2 αντιδρώντα, 2 προϊόντα*
- *Αναγνωρίστε τους στοιχειομετρικούς συντελεστές*
- *Σκεφτείτε τις στοιχειομετρικές αναλογίες*
- *Αφού δίνονται MB μάλλον θα χρειαστεί να μετατρέψουμε βάρη σε mole και το αντίστροφο*

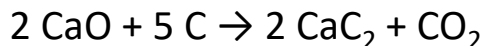


ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 1

ΛΥΣΗ



Το καρβίδιο του ασβεστίου (CaC_2) παρασκευάζεται κατά τη θέρμανση οξειδίου του ασβεστίου (CaO) και άνθρακα (C) σε υψηλή θερμοκρασία.



Διατίθενται 1150 kg CaO . Πόσα kg C απαιτούνται για την πλήρη αντίδραση του CaO και πόσα kg CaC_2 θα παραχθούν; MB: CaO 56, CaC_2 64

	2 CaO	+	5 C	→	2 CaC ₂	+	CO ₂
mol	2		5		2		1
g	2 · 56 = 112		5 · 12 = 60		2 · 64 = 128		1 · 44 = 44

“Μπακάλικος” τρόπος με χρήση αναλογιών ποσοτήτων

Διατίθενται 1150kg CaO , άρα

$$\begin{array}{llllll} \text{kg} & 1150 \text{ kg} & \frac{60}{112} \cdot 1150 = 616.1 \text{ kg} & \frac{128}{112} \cdot 1150 = 1314 \text{ kg} & \frac{44}{112} \cdot 1150 = 452 \text{ kg} \end{array}$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 1

“Ορθότερος” τρόπος με *χρήση στοιχειομετρικών συντελεστών*



μάζα 1150 kg

mol

$$1150 \text{ kg} \left| \frac{1 \text{ mol}}{56 \text{ g}} \right| \frac{1000 \text{ g}}{\text{kg}} =$$

$$= 20536 \text{ mol}$$

$$\frac{5}{2} 20536 =$$

$$= 51340 \text{ mol}$$

$$\frac{2}{2} 20536$$

$$= 20536 \text{ mol}$$

$$\frac{1}{2} 20536$$

$$= 10268 \text{ mol}$$

$$51340 \text{ mol} \left| \frac{12 \cdot 10^{-3} \text{ kg}}{1 \text{ mol}} \right|$$

$$616.1 \text{ kg}$$

$$20536 \text{ mol} \left| \frac{64 \cdot 10^{-3} \text{ kg}}{1 \text{ mol}} \right|$$

$$1314 \text{ kg}$$

$$10268 \text{ mol} \left| \frac{44 \cdot 10^{-3} \text{ kg}}{1 \text{ mol}} \right|$$

$$452 \text{ kg}$$

Στην πράξη σπάνια χρησιμοποιούνται τα αντιδρώντα στις στοιχειομετρικές τους αναλογίες.

Περιοριστικό αντιδρών: Το αντιδρών που είναι στοιχειομετρικά στη μικρότερη ποσότητα

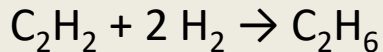
Αντιδρών σε περίσσεια: Το αντιδρών που είναι στοιχειομετρικά σε μεγαλύτερη ποσότητα από το περιοριστικό αντιδρών.

$$\textbf{\underline{Περίσσεια}} = \frac{n_{\text{ΤΡΟΦΟΔΟΣΙΑ}} - n_{\text{ΣΤΟΙΧΕΙΟΜΕΤΡΙΑ}}}{n_{\text{ΣΤΟΙΧΕΙΟΜΕΤΡΙΑ}}}$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 2



20.0 kmol/h ακετυλενίου (C_2H_2) και 50.0 kmol/h H_2 τροφοδοτούνται σε ένα αντιδραστήρα:



- Ποιο είναι το περιοριστικό αντιδρών;
- Ποιο είναι το αντιδρών σε περίσσεια;
- Περίσσεια %;

(Άσχετη ερώτηση): Σχετικά με την απόδοση «**το αντιδρών**» (ουσιαστικό) του αγγλικού όρου reactant, μήπως μπορεί να **γράφεται με όμικρον (το αντιδρόν)**, κατ'αναλογία με το ποιόν; Απάντηση: «Όχι» με το ακόλουθο σκεπτικό:

Αφού είναι: ο αντιδρών, η αντιδρώσα, το αντιδρών. Ο αντιδρών ηλεκτρολύτης, η αντιδρώσα ουσία, το αντιδρών σώμα. Και ουσιαστικό να γίνει δεν θα αλλάξει την κλίση. Είναι το αντιδρών – του αντιδρώντος. Αν ακολουθήσει το ποιόν (γεν. του ποιού) θα πρέπει να γίνει: το αντιδρόν – του αντιδρού (αποκλείεται τέτοια επέμβαση...).

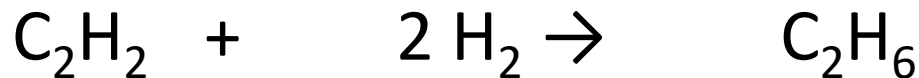
Μια απλοποίηση θα ήταν να γράφεται με ο και να κλίνεται: το αντιδρόν – του αντιδρόντος (κατά τα: ιόν – ιόντος, ανιόν – ανιόντος, προϊόν – προϊόντος); Αλλά, όμως, δεν μπορούμε να το δούμε αποσπασματικά και μεμονωμένα. Τι θα γίνει με την αντιδρώσα; Εφόσον χρησιμοποιούνται ακόμα οι μετοχές αυτές, δεν υπάρχει δυνατότητα αλλαγής. Χρησιμοποιούμε ακόμα την μετοχή: ζων, ζώσα, ζων και τη μετοχή: κυβερνών, κυβερνώσα, κυβερνών (το κυβερνών κόμμα). Και στη φυσική, ανακλών, ανακλώσα, ανακλών (ανακλώσα επιφάνεια) και διαθλών, διαθλώσα, διαθλών κ.ά

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 2

20.0 kmol/h ακετυλενίου (C_2H_2) και 50.0 kmol/h H_2 τροφοδοτούνται σε ένα αντιδραστήρα: $C_2H_2 + 2 H_2 \rightarrow C_2H_6$ Ποιο είναι το περιοριστικό αντιδρών; Ποιο είναι το αντιδρών σε περίσσεια; Περίσσεια %;

ΛΥΣΗ

Βάση υπολογισμών 1h



1 mol

2 mol

20 kmol

$$\frac{2}{1} \cdot 20 \text{ kmol} = 40 \text{ kmol}$$

Στοιχειομετρικά απαιτούμενα ($n_{stoichiometric}$)

20 kmol

50 kmol

Διατίθενται (τροφοδοσία) (n_{feed})



C_2H_2

Περιοριστικό
αντιδρών
(limiting
reactant)



H_2

Αντιδρών σε
περίσσεια
(excess
reactant)

Περίσσεια (H_2)

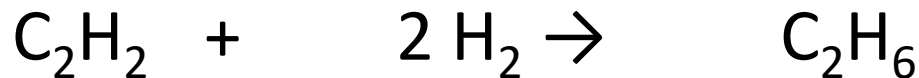
$$\frac{n_{\text{ΤΡΟΦΟΔΟΣΙΑ}} - n_{\text{ΣΤΟΙΧΕΙΟΜΕΤΡΙΑ}}}{n_{\text{ΣΤΟΙΧΕΙΟΜΕΤΡΙΑ}}} = \frac{50 - 40}{40} \\ = 0.25 = \mathbf{25\%}$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 2

20.0 kmol/h ακετυλενίου (C_2H_2) και 50.0 kmol/h H_2 τροφοδοτούνται σε ένα αντιδραστήρα: $C_2H_2 + 2 H_2 \rightarrow C_2H_6$ Ποιο είναι το περιοριστικό αντιδρών; Ποιο είναι το αντιδρών σε περίσσεια; Περίσσεια %;

ΛΥΣΗ

Βάση υπολογισμών 1h



1 mol

2 mol

$$\frac{1}{2} \cdot 50 = \mathbf{25 \text{ kmol}} \quad \mathbf{50 \text{ kmol}}$$

$$\mathbf{20 \text{ kmol}} \quad \mathbf{50 \text{ kmol}}$$



Περιοριστικό
αντιδρών
(*limiting
reactant*)



Αντιδρών σε
περίσσεια
(*excess
reactant*)

Και αν αντί να τσεκάρω με βάση το C_2H_2 δοκίμαζα με το H_2 ;

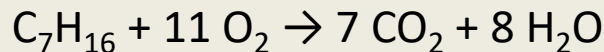
Στοιχειομετρικά απαιτούμενα ($n_{stoichiometric}$)

Διατίθενται (τροφοδοσία) (n_{feed})

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 3



80 g C_7H_{16} αντιδρούν με 480 g O_2 σύμφωνα με την αντίδραση:



Ποιο είναι το περιοριστικό αντιδρών;

Ποιο είναι το αντιδρών σε περίσσεια;

Πόση είναι η % περίσσεια;

Για πλήρη αντίδραση, πόσα g CO_2 και H_2O θα παραχθούν και τι υπάρχει (mol %) στο προϊόν;

Hint:



- *Don't panic, too many questions, too little time*
- *Οι πρώτες τρεις ερωτήσεις είναι παρόμοιες με το προηγούμενο παράδειγμα, απλά μάλλον πρέπει να μετατρέψουμε τα g σε moles*
- *Για την τελευταία ερώτηση ας βγάλουμε πρώτα άκρη με στοιχειομετρίες και moles και βλέπουμε...*

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 3

80 g C_7H_{16} αντιδρούν με 480 g O_2 σύμφωνα με την αντίδραση: $C_7H_{16} + 11 O_2 \rightarrow 7 CO_2 + 8 H_2O$
Ποιο είναι το περιοριστικό αντιδρών; Ποιο είναι το αντιδρών σε περίσσεια; Πόση είναι η % περίσσεια;

ΛΥΣΗ

Βήμα 1: Μετατροπή g σε moles

$$C_7H_{16} \quad 80g = 80g \frac{1 \text{ mol}}{100 \text{ g}} = 0.80 \text{ mol}$$

$$O_2 \quad 480g = 480g \frac{1 \text{ mol}}{32 \text{ g}} = 15.0 \text{ mol}$$

Βήμα 2: Check περιοριστικό αντιδρών / αντιδρών σε περίσσεια

Στοιχειομετρική αναλογία $\frac{O_2}{C_7H_{16}} = \frac{11}{1} = \mathbf{11} < \frac{15}{0.8} = \mathbf{18.8}$ Διατιθέμενη αναλογία

O_2 είναι αντιδρών σε **περίσσεια**
 C_7H_{16} **περιοριστικό αντιδρών**

Περίσσεια (O_2)

$$\frac{n_{\text{ΤΡΟΦΟΔΟΣΙΑ } O_2} - n_{\text{ΣΤΟΙΧΕΙΟΜΕΤΡΙΑ } O_2}}{n_{\text{ΣΤΟΙΧΕΙΟΜΕΤΡΙΑ } O_2}} = \frac{15.0 - (11 \cdot 0.8)}{11 \cdot 0.8} = 0.705 = \mathbf{70.5\%}$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 3

Για **πλήρη αντίδραση**, πόσα g CO₂ και H₂O θα παραχθούν και τι υπάρχει (mol %) στο προϊόν;

Προφανώς του περιοριστικού αντιδρώντος (ήτοι C₇H₁₆)

Βήμα 3: Μετατροπή moles σε g



Αντιδρούν & παράγονται	0.8 mol 80g	$\frac{11}{1} \cdot 0.8 = 8.8 \text{ mol}$ $8.8 \cdot 32 = 281.6 \text{ g}$	$\frac{7}{1} \cdot 0.8 = 5.6 \text{ mol}$ $5.6 \cdot 44 = 246.4 \text{ g}$	$\frac{8}{1} \cdot 0.8 = 6.4 \text{ mol}$ $6.4 \cdot 18 = 115.2 \text{ g}$
Θα υπάρχουν στο «προϊόν»	0 mol 0 g	$15.0 - 8.8 = 6.2 \text{ mol}$ $480 - 281.6 = 198.4 \text{ g}$	5.6 mol 246.4 g	6.4 mol 115.2 g
Προϊόν (mol %)	$\text{Σύνολο moles} = 6.2 + 5.6 + 6.4 = 18.2 \text{ mol}$ $\frac{6.2}{18.2} = 0.341 = 34.1 \%$ $\frac{5.6}{18.2} = 0.308 = 30.8 \%$ $\frac{6.4}{18.2} = 0.351 = 35.1 \%$			

Βαθμός μετατροπής:

Είναι το κλάσμα της τροφοδοσίας (ή ενός υλικού της τροφοδοσίας) που μετατρέπεται σε προϊόντα:

$$f = \frac{mol_{reacted}}{mol_{fed}}$$

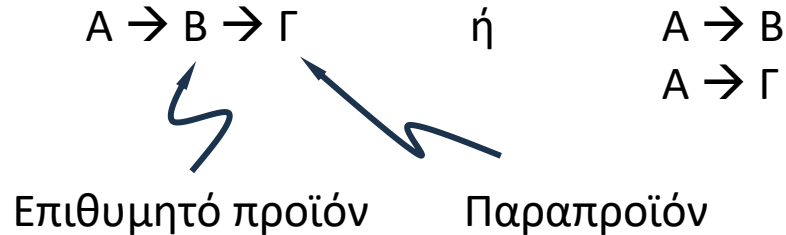
Όταν ο βαθμός μετατροπής αναφέρεται σε περιοριστικό αντιδρών, τότε ορίζεται ως **βαθμός μετατροπής της αντίδρασης**

Απόδοση: Υπάρχουν πολλοί ορισμοί.

- Ο λόγος των mol (ή της μάζας) του επιθυμητού τελικού προϊόντος προς τα mol (ή τη μάζα) του βασικού αντιδρώντος (συνήθως του περιοριστικού) στην τροφοδοσία (Σημ.: έχει τη μεγαλύτερη εφαρμογή)
- Ο λόγος των mol (ή της μάζας) του επιθυμητού τελικού προϊόντος προς τα mol (ή τη μάζα) του βασικού αντιδρώντος (συνήθως του περιοριστικού) που καταναλώνεται (Σημ. είναι ο λόγος των στοιχειομετρικών συντελεστών).
- Ο λόγος των mol (ή της μάζας) του επιθυμητού τελικού προϊόντος που λαμβάνεται προς τη θεωρητική ποσότητα που θα λαμβανόταν για 100% μετατροπή (Σημ.: ουσιαστικά είναι ο βαθμός μετατροπής της αντίδρασης – μικρότερη εφαρμογή)

Εκλεκτικότητα:

Ορίζεται ως το κλάσμα των moles ενός συγκεκριμένου προϊόντος προς τα moles ενός άλλου προϊόντος (συνήθως μη επιθυμητού – παραπροϊόν).



$$\text{Εκλεκτικότητα} = \frac{mol_B}{mol_\Gamma}$$

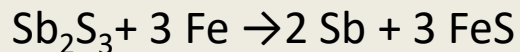
ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 4



HIM.5.2.12



Το αντιμόνιο (Sb) παράγεται με θέρμανση αντιμονίτη (Sb_2S_3) με σκραπ σιδήρου και απομάκρυνση του λιωμένου Sb από τον πυθμένα του αντιδραστήρα:



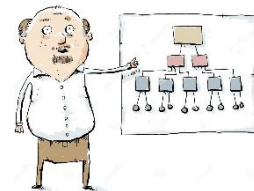
Θερμαίνονται μαζί 600 kg Sb_2S_3 και 250 kg Fe και παράγονται 200 kg Sb.

- (α) Ποιο είναι το περιοριστικό αντιδρών;
- (β) % περίσσεια του αντιδρώντος σε περίσσεια;
- (γ) Βαθμός μετατροπής (κλάσμα) αντίδρασης;
- (δ) Βαθμός μετατροπής (%) με βάση το Sb_2S_3 ;
- (ε) Απόδοση σε kg Sb/kg Sb_2S_3 (τροφοδοσίας);

Hint:

- Μήπως είναι καλό να φτιάξουμε ένα διάγραμμα ροής της διαδικασίας;
- Καλό είναι να δουλέψουμε με mol, δηλ. ας μετατρέψουμε kg σε mol

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 4



Βήμα 1:

Μετατροπή kg σε mol και διάγραμμα ροής



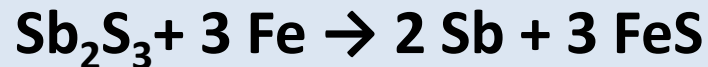
Χημική ένωση	m (kg)	M_i (g/mol)	mol
Sb_2S_3	600	339.7	1766
Fe	250	55.85	4476
Sb	200	121.8	1642
FeS	-	87.91	



ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 4

Βήμα 2:

Περιοριστικό αντιδρών;

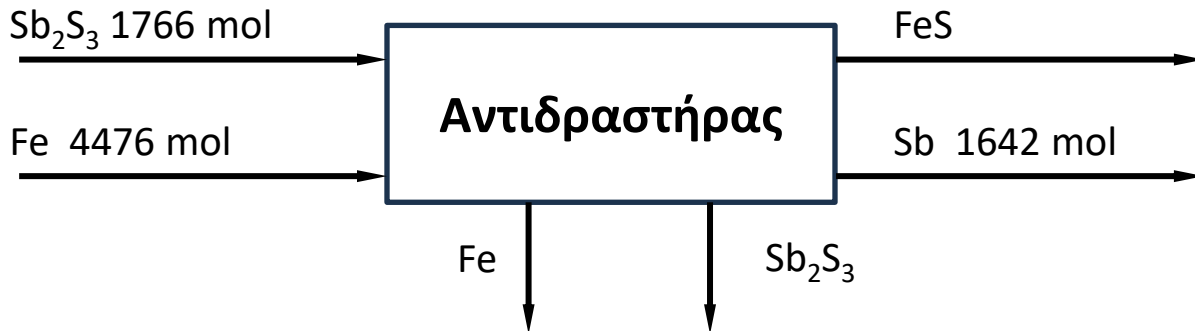


Στοιχειομετρική αναλογία: $\left(\frac{\text{Fe}}{\text{Sb}_2\text{S}_3}\right)_{\text{στοιχ.}} = \frac{3}{1} = 3$

Παρεχόμενη (feed) αναλογία: $\left(\frac{\text{Fe}}{\text{Sb}_2\text{S}_3}\right)_{\text{feed.}} = \frac{4476}{1766} = 2.53$

$\Rightarrow \text{Fe} = \text{Περιοριστικό αντιδρών}$
 $\Rightarrow \text{Sb}_2\text{S}_3 \text{ σε περίσσεια}$

- Καθώς έχουμε περίσσεια Sb_2S_3 κάποια moles σίγουρα θα περισσέψουν
- Επίσης, επειδή δεν είμαστε σίγουροι ότι αντιδρούν όλα τα αντιδρώντα, πιθανά να περισσέψει ΚΑΙ Fe



ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 4

Βήμα 3:

% περίσσεια του αντιδρώντος σε περίσσεια;

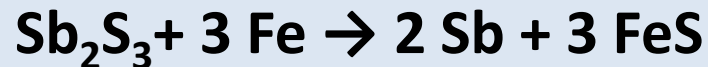
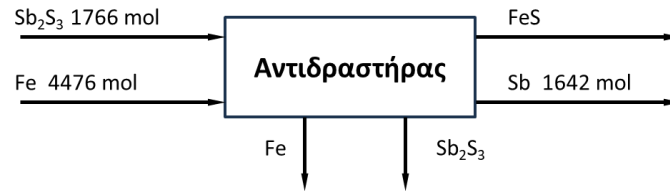
$$\% \text{ Περίσσεια του } \text{Sb}_2\text{S}_3 = \frac{n_{\text{τροφ.}} - n_{\text{στοιχ, αντιμονιτη}}}{n_{\text{στοιχ, αντιμονιτη}}} \quad (1)$$

Ερώτηση: Ναι, αλλά πόσο θα είναι το $n_{\text{στοιχ}}$;

Απάντηση: Θα είναι τα mol εκείνα που χρειάζονται για να αντιδράσουν πλήρως **ΜΕ ΟΛΗ ΤΗΝ ΠΟΣΟΤΗΤΑ** (4476 mol) του Fe (το περιοριστικό αντιδρών)

Σύμφωνα με την στοιχειομετρία: $\frac{\text{mol}_{\text{Sb}_2\text{S}_3}}{\text{mol}_{\text{Fe}}} = \frac{1}{3} = \frac{n_{\text{στοιχ, αντ}}}{4476} \Rightarrow n_{\text{στοιχ, αντ}} = 1492 \text{ mol}$

$$(1) \Rightarrow \% \text{ περίσσεια } \text{Sb}_2\text{S}_3 = \frac{n_{\text{τροφ.}} - n_{\text{στοιχ, αντιμονιτη}}}{n_{\text{στοιχ, αντιμονιτη}}} = \frac{1766 - 1492}{1492} = 0.184 = 18.4\%$$



ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 4

Βήμα 4:

Κλάσμα (βαθμός) μετατροπής
[με βάση το περ. αντιδρών ήτοι το Fe]

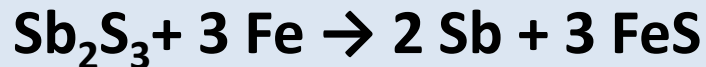
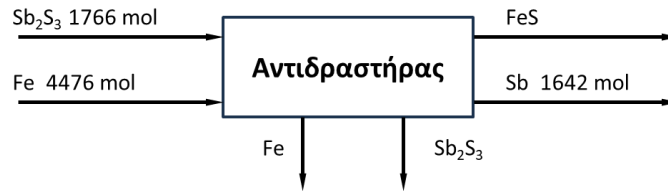
$$f_{Fe} = \frac{mol_{reacted}}{mol_{fed}} = \frac{mol\ Fe\ που\ αντιδρουν}{mol\ Fe\ τροφοδοσίας} \quad (2)$$

Ερώτηση: Ναι, αλλά πόσο θα είναι το $n_{Fe, reacted}$, δηλαδή αυτά που τελικά αντέδρασαν;

Απάντηση: Θα είναι τα mol εκείνα που αντιδρούν, βάσει στοιχειομετρίας, έτσι ώστε να δώσουν την ποσότητα Sb που αναφέρεται ως παραγόμενη (1642 mol)

$$\text{Σύμφωνα με την στοιχειομετρία: } \frac{mol_{Sb}}{mol_{Fe}} = \frac{2}{3} = \frac{n_{Sb, παραγ.}}{n_{Fe, reacted}} = \frac{1642}{n_{Fe, reacted}} \Rightarrow n_{Fe, reacted} = 2463\ mol$$

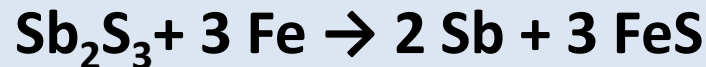
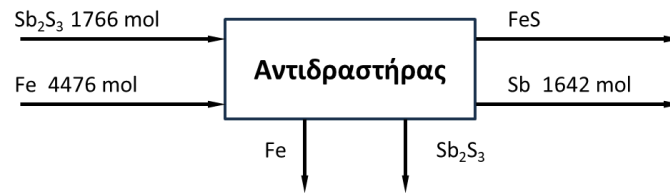
$$(2) \Rightarrow f_{Fe} = \frac{mol\ Fe\ που\ αντιδρουν}{mol\ Fe\ τροφοδοσίας} = \frac{2463}{4476} = 0.55 = 55\%$$



ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 4

Βήμα 5:

Βαθμός μετατροπής (%) με βάση το Sb_2S_3



$$f_{\text{αντιμονιτη}} = \frac{\text{mol}_{\text{reacted}}}{\text{mol}_{\text{fed}}} = \frac{\text{mol αντιμονιτη που αντιδρουν}}{\text{mol αντιμονιτη τροφοδοσιας}} \quad (3)$$

Ερώτηση: Άντε πάλι!!! πόσο θα είναι το $n_{\text{αντιμονιτη, reacted}}$, που τελικά αντέδρασε;

Απάντηση: Θα είναι τα mol εκείνα που αντιδρούν, βάσει στοιχειομετρίας, έτσι ώστε να δώσουν την ποσότητα Sb που αναφέρεται ως παραγόμενη (1642 mol)

$$\text{Σύμφωνα με την στοιχειομετρία: } \frac{\text{mol}_{\text{Sb}}}{\text{mol}_{\text{Sb}_2\text{S}_3}} = \frac{2}{1} = \frac{n_{\text{Sb, παραγ.}}}{n_{\text{Sb}_2\text{S}_3, \text{reacted}}} = \frac{1642}{n_{\text{Sb}_2\text{S}_3, \text{reacted}}} \Rightarrow n_{\text{Sb}_2\text{S}_3, \text{reacted}} = 821 \text{ mol}$$

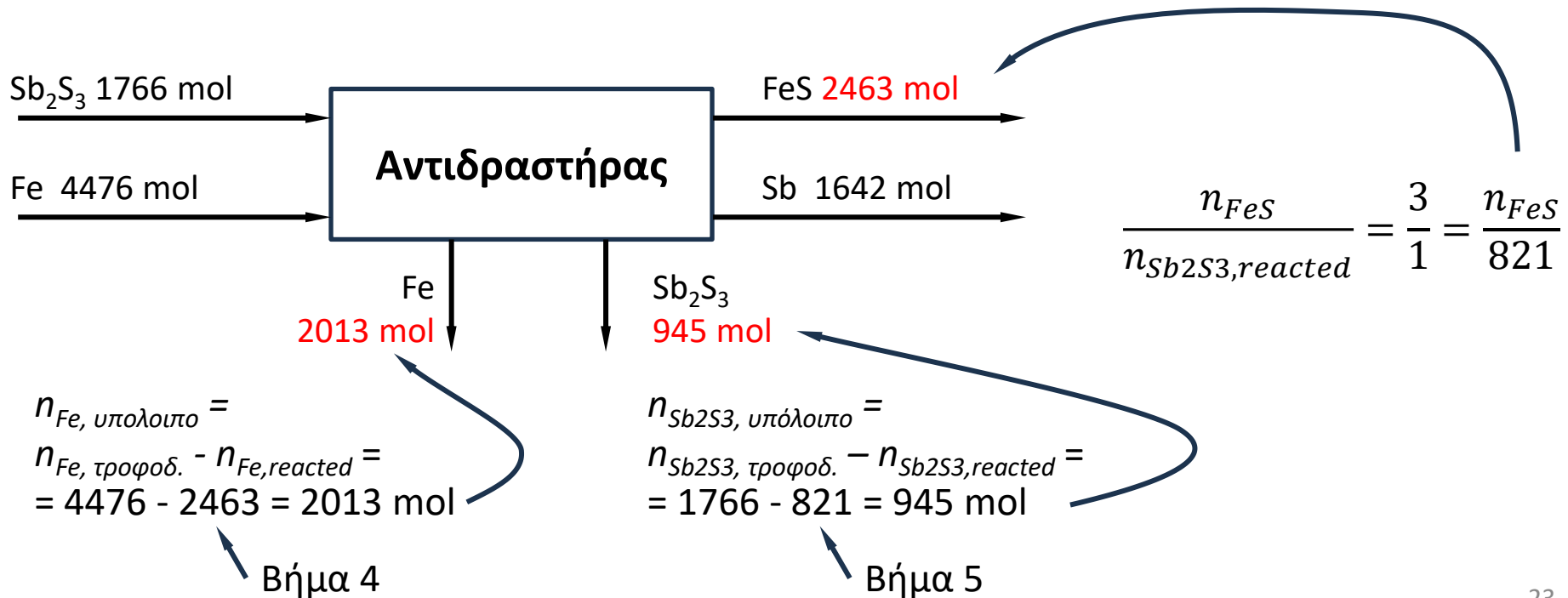
$$(3) \Rightarrow f_{\text{αντιμονιτη}} = \frac{\text{mol αντιμονιτη που αντιδρουν}}{\text{mol αντιμονιτη τροφοδοσιας}} = \frac{821}{1766} = 0.465 = 46.5\%$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 4



Βήμα 6:

Ας κάνουμε μια σούμα (σε mol)
να δούμε που είμαστε (προαιρετικό)

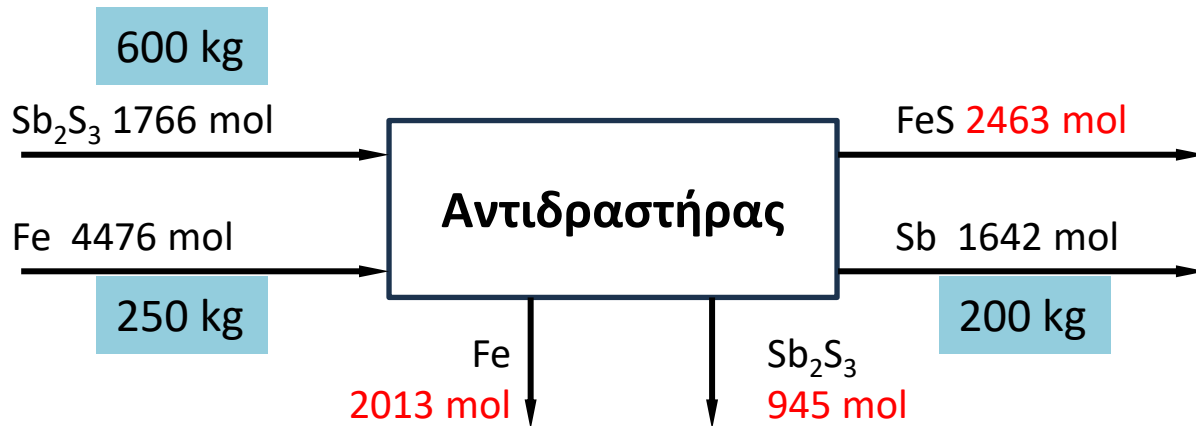


ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 4



Βήμα 7:

Απόδοση σε kg Sb/kg Sb_2S_3 (τροφοδοσίας)



$$\text{Απόδοση} = \frac{200 \text{ kg Sb}}{600 \text{ kg } Sb_2S_3} = \frac{1}{3} = 0.33 \text{ kg Sb / kg } Sb_2S_3$$

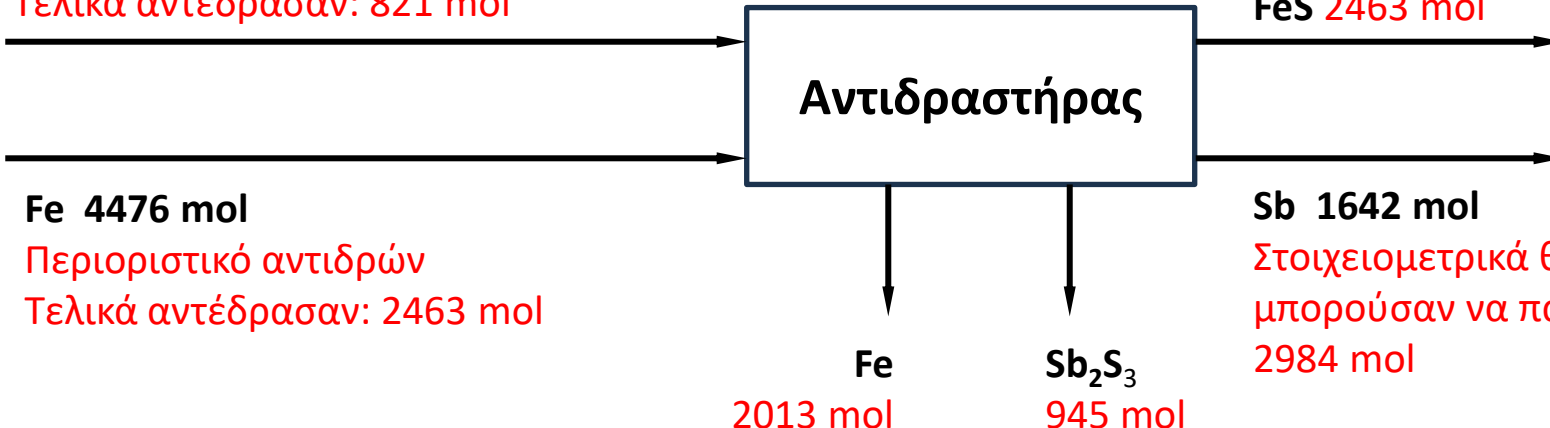


Sb₂S₃ 1766 mol

Σε περίσσεια

Στοιχειομετρικά απαιτούνταν: 1492 mol

Τελικά αντέδρασαν: 821 mol



Μαύρα στοιχεία: Ότι πραγματικά τροφοδοτήθηκε – εξήλθε από τον αντιδραστήρα

Κόκκινα στοιχεία: Πληροφοριακά στοιχεία

Έκταση αντίδρασης:

- Η έκταση της αντίδρασης είναι μια βοηθητική παράμετρος η οποία σε συνδυασμό με τους στοιχειομετρικούς συντελεστές μας επιτρέπει να υπολογίσουμε τις ποσότητες των προϊόντων – αντιδρώντων σε μια χημική αντίδραση (όπου συνήθως δεν καταναλώνεται όλη η ποσότητα των αντιδρώντων, δηλαδή μετατροπή ΟΧΙ 100%)
- Συμβολίζεται με το γράμμα ξ
- Μετριέται σε mol ή mol/h ή
- **Δηλώνει πόσα mol (ή mol/h) ενός αντιδρώντος έχουν αντιδράσει.** Με βάση τη στοιχειομετρία υπολογίζονται σε συνάρτηση του ξ :
 - ❖ οι ποσότητες των υπολοίπων αντιδρώντων που αντέδρασαν και
 - ❖ οι ποσότητες των προϊόντων που έχουν παραχθεί

ΕΚΤΑΣΗ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗΣ – ΑΤΕΛΕΙΣ ΑΝΤΙΔΡΑΣΕΙΣ

Για μια ένωση ή στοιχείο (i) που συμμετέχει σε μια χημική αντίδραση ισχύει το ισοζύγιο μάζας χημικής ένωσης **σε μόνιμη κατάσταση**, ήτοι:

$$\text{ΕΙΣΡΟΗ} + \text{ΠΑΡΑΓΩΓΗ} = \text{ΕΚΡΟΗ} + \text{ΚΑΤΑΝΑΛΩΣΗ}$$

με άλλα λόγια δηλαδή:

$$n_i = n_{i,0} \pm v_i \cdot \xi$$

όπου n_i mol της χημικής ένωσης (i) στο ΤΕΛΟΣ της αντίδρασης
 $n_{i,0}$ mol της χημικής ένωσης (i) ΠΡΙΝ την αντίδραση (δηλ. τροφοδοσία)
 v_i στοιχειομετρικός συντελεστής της χημ. ένωσης (i) στην αντίδραση
 ξ έκταση της αντίδρασης (mol)

ΕΚΤΑΣΗ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗΣ – ΑΤΕΛΕΙΣ ΑΝΤΙΔΡΑΣΕΙΣ

Για παράδειγμα, ας υποθέσουμε ότι έχουμε την γενική αντίδραση (βλ. Παράδειγμα 7):



ΕΙΣΡΟΗ

+

ΠΑΡΑΓΩΓΗ

=

ΕΚΡΟΗ

+

ΚΑΤΑΝΑΛΩΣΗ

Για την οποία μας δίνονται αρχικές και τελικές τιμές για τα n_i (ή $\dot{n}_i$ αν πρόκειται για ρυθμούς). Τότε, σύμφωνα με τον ορισμό της έκτασης της αντίδρασης $n_i = n_{i,0} \pm \nu_i \cdot \xi$ θα έχουμε τα ακόλουθα:

$$n_A = n_{A,0} - a \cdot \xi_A \quad (1^*)$$

$$n_B = n_{B,0} - b \cdot \xi_B \quad (2^*)$$

$$n_\Gamma = n_{\Gamma,0} - c \cdot \xi_\Gamma \quad (3^*)$$

$$n_\Delta = n_{\Delta,0} + d \cdot \xi_\Delta \quad (4^*)$$

$$n_E = n_{E,0} + e \cdot \xi_E \quad (5^*)$$

Όπου όμως, $\xi_A = \xi_B = \xi_\Gamma = \xi_\Delta = \xi_E = \xi$ καθώς η έκταση της αντίδρασης είναι κοινή για όλα τις συμμετέχουσες ενώσεις.

Δηλαδή τα moles των συμμετεχόντων ενώσεων αυξάνονται ή μειώνονται βάσει μιας κοινής τιμής moles, πολλαπλασιασμένη με τον εκάστοτε στοιχειομετρικό συντελεστή με το σωστό πρόσημο (+ αν είναι προϊόν, ή – αν είναι αντιδρών)

Άρα, η ορθή αναγραφή (και επίλυση μέσω έκτασης αντίδρασης) είναι η ακόλουθη:

$$n_i = n_{i,0} \pm \nu_i \cdot \xi$$

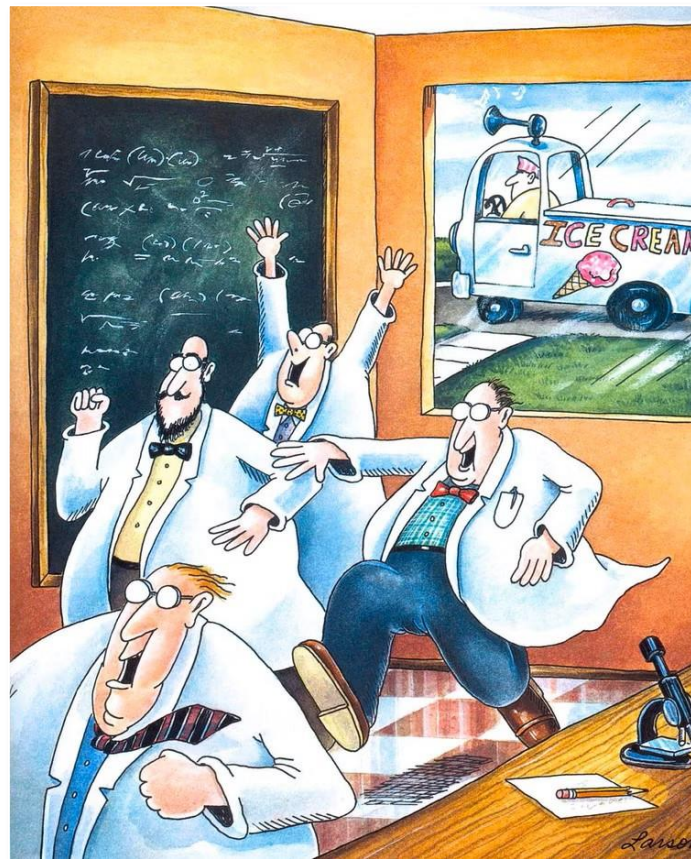
$$n_A = n_{A,0} - a \cdot \xi \quad (1)$$

$$n_B = n_{B,0} - b \cdot \xi \quad (2)$$

$$n_{\Gamma} = n_{\Gamma,0} - c \cdot \xi \quad (3)$$

$$n_{\Delta} = n_{\Delta,0} + d \cdot \xi \quad (4)$$

$$n_E = n_{E,0} + e \cdot \xi \quad (5)$$



Υπάρχει, όμως, και η έννοια της **μέγιστης έκτασης της αντίδρασης, για κάθε συμμετέχουσα ουσία**.

$\xi_{i, \max}$ είναι η έκταση της αντίδρασης αναφορικά με το συστατικό i , αν όλη η διαθέσιμη ποσότητα αυτού αντιδρούσε πλήρως, δηλαδή (για το προηγούμενο παράδειγμά μας):

$$0 = n_{A,0} - a \cdot \xi_{A, \max} \quad (6^*) \quad \Rightarrow \quad \xi_{A, \max} = \frac{0 - n_{A,0}}{-a}$$

$$0 = n_{B,0} - b \cdot \xi_{B, \max} \quad (7^*) \quad \Rightarrow \quad \xi_{B, \max} = \frac{0 - n_{B,0}}{-b}$$

$$0 = n_{\Gamma,0} - c \cdot \xi_{\Gamma, \max} \quad (8^*) \quad \Rightarrow \quad \xi_{\Gamma, \max} = \frac{0 - n_{\Gamma,0}}{-c}$$

Περιοριστικό αντιδρών είναι αυτό με το μικρότερο $\xi_{\max}$
Ναι αλλά γιατί;

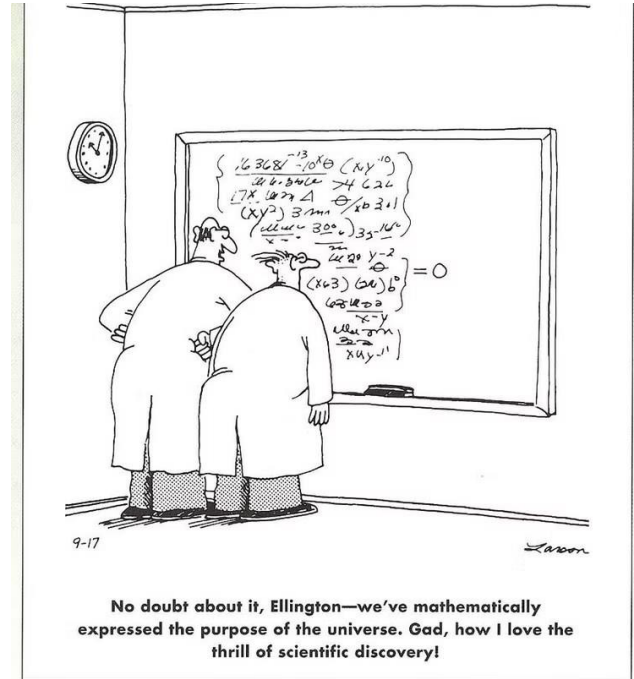
Ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να ελέγξουμε μεταξύ του A και του B ποιο είναι το περιοριστικό αντιδρών, και ας υποθέσουμε ότι $\xi_{A,\max} > \xi_{B,\max}$

$$\xi_{A,\max} = \frac{0-n_{A,0}}{-a} > \xi_{B,\max} = \frac{0-n_{B,0}}{-b} \Rightarrow \frac{b}{a} \cdot n_{A,0} > n_{B,0} \quad (1)$$



Όμως, η ποσότητα $\frac{b}{a} \cdot n_{A,0}$ είναι τα **mole B** που απαιτούνται για να αντιδράσουν πλήρως τα $n_{A,0}$ αλλά σύμφωνα με την (1) τα διαθέσιμα mol B ($n_{B,0}$) δεν επαρκούν!

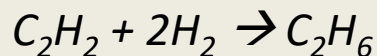
Επομένως, συγκριτικά, το συστατικό B είναι σε «έλλειψη» και άρα (μεταξύ τους) το B είναι το περιοριστικό αντιδρών.



ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 5

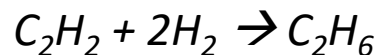


Έχουμε 20.0 kmol/h ακετυλενίου (C_2H_2), 50.0 kmol/h H_2 και 50.0 kmol αιθανίου C_2H_6 και ύστερα από κάποιο χρόνο αντιδρούν 30.0 kmol H_2 . Χρησιμοποιώντας την έννοια της έκτασης της αντίδρασης, υπολογίστε την ποσότητα των αντιδρώντων και προϊόντων σε αυτόν τον χρόνο.



Hint:

- Τροποποίηση του παραδείγματος 2.
- Εκεί είχαμε λύσει το «υπαρξιακό» πρόβλημα ποιο ήταν το περιοριστικό αντιδρών (C_2H_2) και ποιο το αντιδρών σε περίσσεια (H_2)
- Το εύλογο ερώτημα, βέβαια, αφορά στο αν η αντίδραση είναι ατελής. Στο παράδειγμα 2 είχαμε βρει ότι η στοιχειομετρική αναλογία του H_2 για πλήρη κατανάλωση του ακετυλενίου ήταν 40kmol.
→ η αντίδραση είναι ατελής

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 5

Υπολογισμός της έκτασης της αντίδρασης (ξ) με βάση το H_2

$$n_{\text{H}_2} = n_{\text{H}_2,0} \pm \nu_{\text{H}_2} \cdot \xi \Leftrightarrow \xi = \frac{n_{\text{H}_2} - n_{\text{H}_2,0}}{\nu_{\text{H}_2}} \quad (1)$$

από τα οποία ξέρουμε το $n_{\text{H}_2,0} = 50 \text{ kmol}$, το $\nu_{\text{H}_2} = -2$ (αντιδρών), άρα πρέπει να βρούμε το n_{H_2} δηλ. την ποσότητα μετά από χρόνο t .

$$n_{\text{H}_2} = n_{\text{αρχικό}} - n_{\text{αντέδρασε}} = 50 - 30 = 20 \text{ kmol},$$

$$\text{οπότε } \xi = \frac{n_{\text{H}_2} - n_{\text{H}_2,0}}{\nu_{\text{H}_2}} = \frac{20 - 50}{-2} = \frac{-30}{-2} = 15 \text{ kmol}$$

Επομένως:

$$\begin{aligned} n_{\text{H}_2} &= n_{\text{H}_2,0} - 2 \cdot \xi = 50 - 2 \cdot 15 = 20 \text{ kmol} \quad (\text{σημ. αν και το είχαμε ήδη υπολογίσει}) \\ n_{\text{C}_2\text{H}_2} &= n_{\text{C}_2\text{H}_2,0} - 1 \cdot \xi = 20 - 1 \cdot 15 = 5 \text{ kmol} \\ n_{\text{C}_2\text{H}_6} &= n_{\text{C}_2\text{H}_6,0} + 1 \cdot \xi = 50 + 1 \cdot 15 = 65 \text{ kmol} \end{aligned}$$

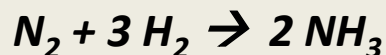
Ερώτηση: Γιατί με βάση το H_2 και όχι με βάση το C_2H_2 ;

Απάντηση: Γιατί για το H_2 μας δίνονται δεδομένα για χρόνο t

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 6



Έστω ότι έχουμε την παραγωγή αμμωνίας



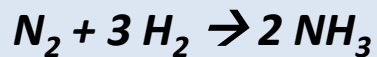
με αντιδραστήρα συνεχούς λειτουργίας με τροφοδοσία 100 mol/s N_2 300 mol/s H_2 και 1 mol/s Ar (αδρανές αέριο). Να υπολογίσετε τις ροές των προϊόντων αν ο βαθμός μετατροπής του H_2 είναι 0.60 (δηλ. 60%):

- α) με χρήση της έκτασης της αντίδρασης ξ
- β) μέσω ατομικών ισοζυγίων
- γ) μέσω της στοιχειομετρίας της αντίδρασης (δηλ. όπως Παράδειγμα 1)

Hint:

- *Don't panic.* Δεν βοηθάει ποτέ
- Αντίθετα, ο βαθμός μετατροπής του H_2 υποδεικνύει ατελή αντίδραση
- Προφανώς, στα «προϊόντα» θα έχουμε υπολειπόμενο H_2
- Πιθανά να βοηθήσει να σχεδιάσουμε το διάγραμμα ροής

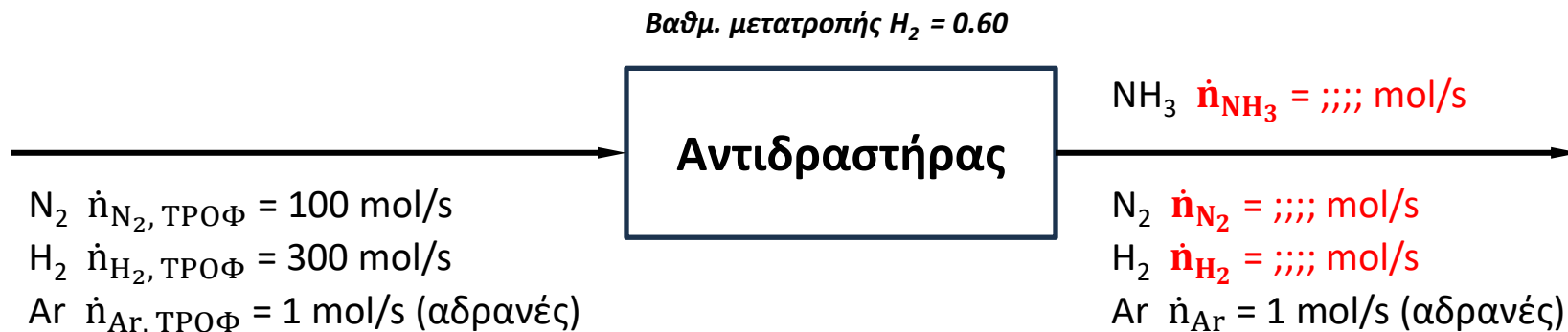


ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 6

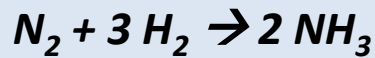
Έστω ότι έχουμε την παραγωγή αμμωνίας με αντιδραστήρα συνεχούς λειτουργίας με τροφοδοσία 100 mol/s N_2 , 300 mol/s H_2 και 1 mol/s Ar (αδρανές αέριο). Να υπολογίσετε τις ροές των προϊόντων αν ο βαθμός μετατροπής του H_2 είναι 0.60 (δηλ. 60%):

Βήμα 1:

Διάγραμμα ροής



ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 6



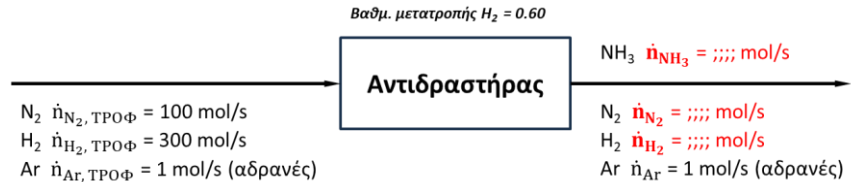
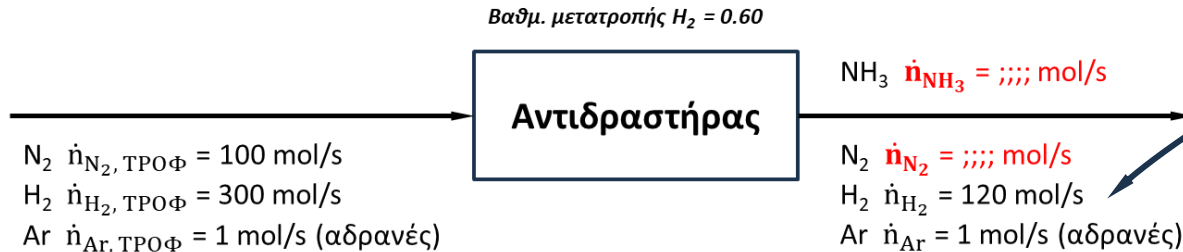
Βήμα 2:

Τι μπορούμε, άραγε, να υπολογίσουμε από τον βαθμό μετατροπής $f = \frac{\text{mol}_{\text{reacted}}}{\text{mol}_{\text{fed}}}$ του H_2 ;

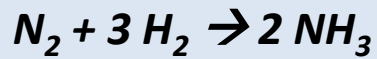
$$f_{\text{H}_2} = 0.60 = \frac{\text{mol}_{\text{H}_2 \text{ αντεδρασσαν}}}{\text{mol}_{\text{H}_2 \text{ τροφοδοσιας}}} = \frac{\text{mol}_{\text{H}_2 \text{ τροφοδοσιας}} - \text{mol}_{\text{H}_2 \text{ που ΔΕΝ αντεδρασσαν}}}{\text{mol}_{\text{H}_2 \text{ τροφοδοσιας}}} = \frac{\dot{n}_{\text{H}_2, \text{τροφ}} - \dot{n}_{\text{H}_2}}{\dot{n}_{\text{H}_2, \text{τροφ}}} =$$

$$= \frac{300 - \dot{n}_{\text{H}_2}}{300} \quad \Rightarrow \quad \dot{n}_{\text{H}_2} = 120 \text{ mol/s}$$

Άρα το διάγραμμα ροής επικαιροποιείται ως εξής:



ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 6



Βήμα 3:

(α) Υπολογισμοί μέσω έκτασης αντίδρασης

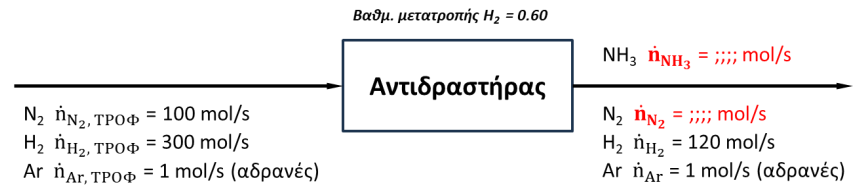
$$n_i = n_{i,0} \pm \nu_i \cdot \xi \quad \Leftrightarrow$$

$$\dot{n}_{\text{N}_2} = \dot{n}_{\text{N}_2, \text{τροφ}} - 1 \cdot \dot{\xi} \quad \Leftrightarrow \dot{n}_{\text{N}_2} = 100 - \dot{\xi} \quad [\text{mol/s}] \quad (1)$$

$$\dot{n}_{\text{H}_2} = \dot{n}_{\text{H}_2, \text{τροφ}} - 3 \cdot \dot{\xi} = \quad \Leftrightarrow 120 = 300 - 3 \cdot \dot{\xi} \quad [\text{mol/s}] \quad (2)$$

$$\dot{n}_{\text{NH}_3} = \dot{n}_{\text{NH}_3, \text{τροφ}} + 2 \cdot \dot{\xi} \quad \Leftrightarrow \dot{n}_{\text{NH}_3} = 0 + 2 \cdot \dot{\xi} \quad [\text{mol/s}] \quad (3)$$

$$\dot{n}_{\text{Ar}} = 1 \text{ mol/s}$$

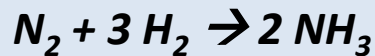


$$(2) \Leftrightarrow \dot{\xi} = 60 \text{ mol/s}$$

$$(1) \Leftrightarrow \dot{n}_{\text{N}_2} = 100 - 60 = 40 \text{ mol/s}$$

$$(3) \Leftrightarrow \dot{n}_{\text{NH}_3} = 2 \cdot 60 = 120 \text{ mol/s}$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 6



Βήμα 4:

(β) Υπολογισμοί μέσω ατομικών ισοζυγίων

Ισοζύγιο N

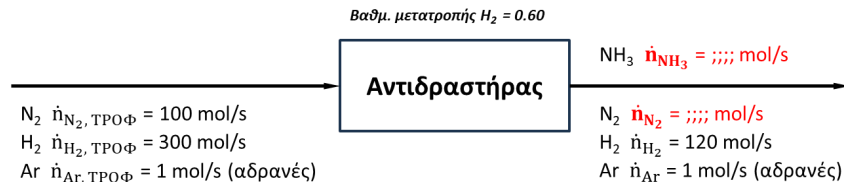
$$N_{\text{IN}} = N_{\text{OUT}} \text{ δηλαδή } N_{\text{στο N}_2 \text{ ΤΡΟΦ}} = N_{\text{στο N}_2 \text{ ΕΞΟΔ}} + N_{\text{στην NH}_3 \text{ ΕΞΟΔ}}$$

$$\begin{aligned} \text{Άρα υπό μορφή ροών:} \quad 2 \cdot \dot{n}_{\text{N}_2, \text{τροφ}} &= 2 \cdot \dot{n}_{\text{N}_2} + 1 \cdot \dot{n}_{\text{NH}_3} \Leftrightarrow \\ 2 \cdot 100 &= 2 \cdot \dot{n}_{\text{N}_2} + 1 \cdot \dot{n}_{\text{NH}_3} \end{aligned} \quad (4)$$

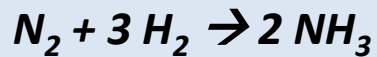
Ισοζύγιο H

$$H_{\text{IN}} = H_{\text{OUT}} \text{ δηλαδή } H_{\text{στο H}_2 \text{ ΤΡΟΦ}} = H_{\text{στο H}_2 \text{ ΕΞΟΔ}} + H_{\text{στην NH}_3 \text{ ΕΞΟΔ}}$$

$$\begin{aligned} \text{Άρα υπό μορφή ροών:} \quad 2 \cdot \dot{n}_{\text{H}_2, \text{τροφ}} &= 2 \cdot \dot{n}_{\text{H}_2} + 3 \cdot \dot{n}_{\text{NH}_3} \Leftrightarrow \\ 2 \cdot 300 &= 2 \cdot 120 + 3 \cdot \dot{n}_{\text{NH}_3} \Leftrightarrow \dot{n}_{\text{NH}_3} = 120 \text{ mol/s} \\ (4) \Leftrightarrow \dot{n}_{\text{N}_2} &= 40 \text{ mol/s} \end{aligned}$$



ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 6



Βαθμ. μετατροπής $\text{H}_2 = 0.60$

N_2 $\dot{n}_{\text{N}_2, \text{TPOΦ}} = 100 \text{ mol/s}$
 H_2 $\dot{n}_{\text{H}_2, \text{TPOΦ}} = 300 \text{ mol/s}$
 Ar $\dot{n}_{\text{Ar, TPOΦ}} = 1 \text{ mol/s}$ (αδρανές)

Αντιδραστήρας

NH_3 $\dot{n}_{\text{NH}_3} = ;;; \text{ mol/s}$
 N_2 $\dot{n}_{\text{N}_2} = ;;; \text{ mol/s}$
 H_2 $\dot{n}_{\text{H}_2} = 120 \text{ mol/s}$
 Ar $\dot{n}_{\text{Ar}} = 1 \text{ mol/s}$ (αδρανές)

Βήμα 4:

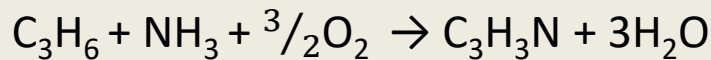
(γ) μέσω της στοιχειομετρίας της αντίδρασης

[mol/s]	N_2	+	3H_2	$\rightarrow$	2NH_3
Στοιχειομετρική αναλογία	1		3		2
Είσοδος	100		300		-
Έξοδος	$\dot{n}_{\text{N}_2}$		$\dot{n}_{\text{H}_2} = 120$		$\dot{n}_{\text{NH}_3}$
Αντιδρούν ή παράγονται	$100 - \dot{n}_{\text{N}_2}$		$300 - 120 = 180$ $(= f_{\text{H}_2} \cdot 300)$		$\dot{n}_{\text{NH}_3}$
Στοιχειομετρική αναλογία βάσει του H_2	$\frac{\text{N}_2}{\text{H}_2} = \frac{1}{3} = \frac{100 - \dot{n}_{\text{N}_2}}{180}$ $\Rightarrow \dot{n}_{\text{N}_2} = 40 \text{ mol/s}$				$\frac{\text{NH}_3}{\text{H}_2} = \frac{2}{3} = \frac{\dot{n}_{\text{NH}_3}}{180}$ $\Rightarrow \dot{n}_{\text{NH}_3} = 120 \text{ mol/s}$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 7



Το ακρυλονιτρίλιο ($\text{C}_3\text{H}_3\text{N}$) παράγεται σύμφωνα με την ακόλουθη αντίδραση και επιτυγχάνεται μια μετατροπή 30.0% του περιοριστικού αντιδρώντος.



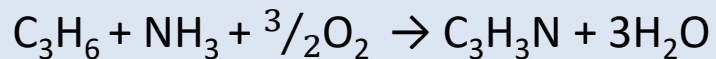
Η τροφοδοσία έχει σύσταση: 10.0% mol προπυλένιο, 12.0% mol αμμωνία και 78% mol αέρα. Θεωρείστε σύσταση αέρα 21% O_2 και 79% N_2 . Με βάση 100 mol τροφοδοσίας, βρείτε τα ακόλουθα:

- α) Περιοριστικό αντιδρών
- β) Περίσσεια υπολοίπων αντιδρώντων
- γ) Σύσταση του προϊόντος.

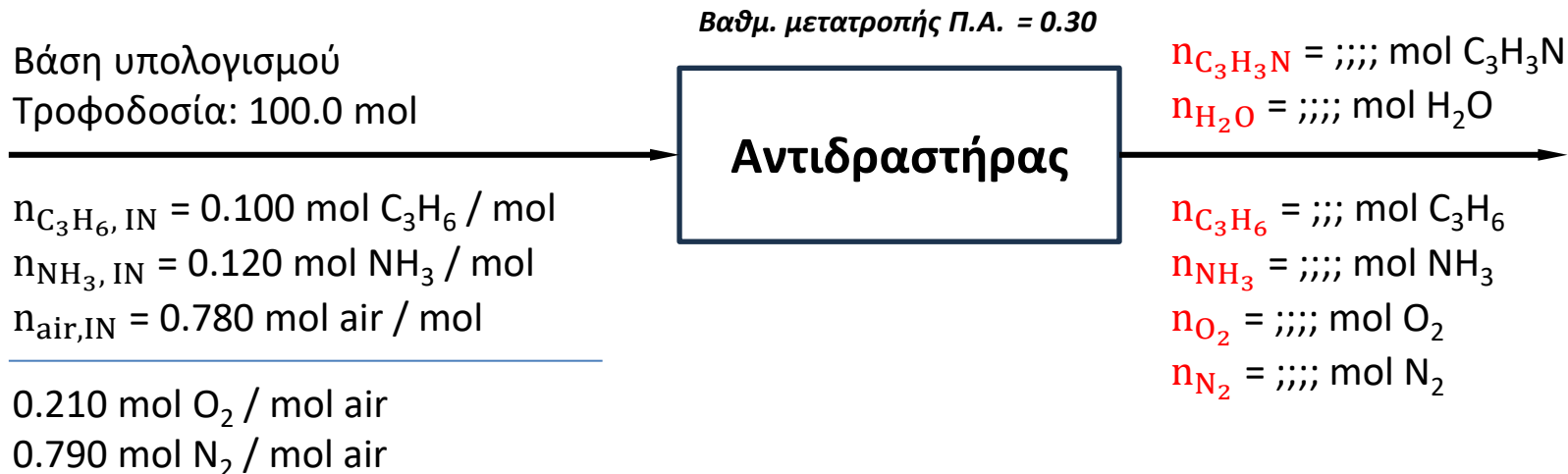
Hint:

- *Don't panic. Αν χρειαστεί, κάντε..... αέρα ☺*
- *Αφού δίνεται βαθμός μετατροπής μιλάμε για ατελή αντίδραση*
- *Στο «προϊόν» θα έχουμε σχεδόν τα πάντα, think about it*

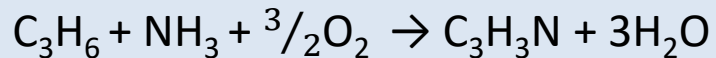


ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 7**Βήμα 1:**

Διάγραμμα ροής



ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 7



Βήμα 2:

Σύσταση εισόδου

Βάση υπολογισμού
Τροφοδοσία: 100.0 mol

$$n_{\text{C}_3\text{H}_6, \text{IN}} = 0.100 \text{ mol C}_3\text{H}_6 / \text{mol}$$

$$n_{\text{NH}_3, \text{IN}} = 0.120 \text{ mol NH}_3 / \text{mol}$$

$$n_{\text{air,IN}} = 0.780 \text{ mol air / mol}$$

$$0.210 \text{ mol O}_2 / \text{mol air}$$

$$0.790 \text{ mol N}_2 / \text{mol air}$$

Βαθμ. μετατροπής Π.Α. = 0.30

Αντιδραστήρας

$$n_{\text{C}_3\text{H}_3\text{N}} = ;;; \text{ mol C}_3\text{H}_3\text{N}$$

$$n_{\text{H}_2\text{O}} = ;;; \text{ mol H}_2\text{O}$$

$$n_{\text{C}_3\text{H}_6} = ;;; \text{ mol C}_3\text{H}_6$$

$$n_{\text{NH}_3} = ;;; \text{ mol NH}_3$$

$$n_{\text{O}_2} = ;;; \text{ mol O}_2$$

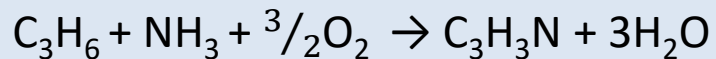
$$n_{\text{N}_2} = ;;; \text{ mol N}_2$$

$$n_{\text{C}_3\text{H}_6, \text{IN}} = 0.100 \frac{\text{mol C}_3\text{H}_6}{\text{mol τροφοδοσία}} \cdot 100 \text{ mol τροφοδ} = 10.0 \text{ mol}$$

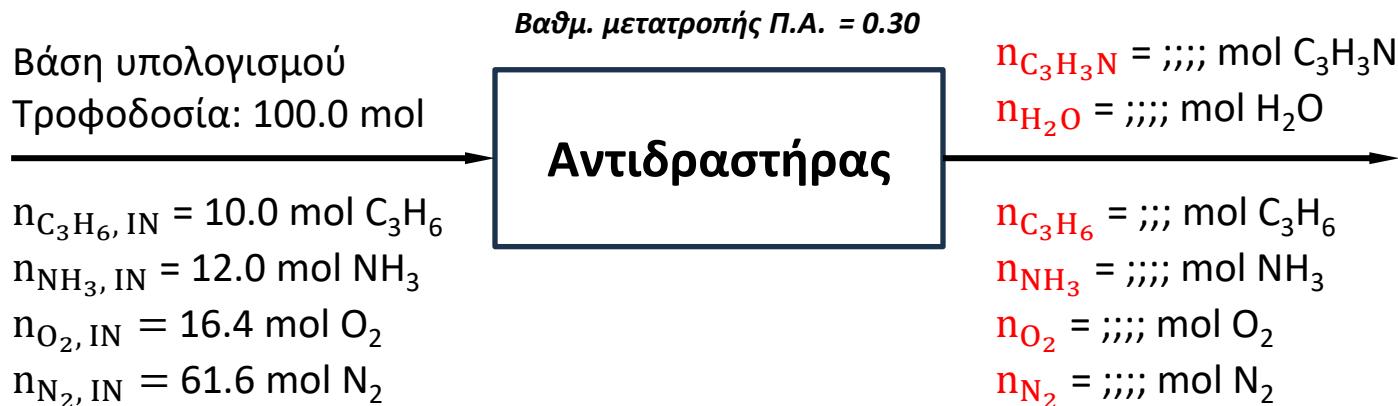
$$n_{\text{NH}_3, \text{IN}} = 0.120 \frac{\text{mol NH}_3}{\text{mol τροφοδοσία}} \cdot 100 \text{ mol τροφοδ} = 12.0 \text{ mol}$$

$$n_{\text{O}_2, \text{IN}} = 78 \text{ mol air} \cdot \left| \frac{0.21 \text{ mol O}_2}{1 \text{ mol air}} \right| = 16.4 \text{ mol O}_2$$

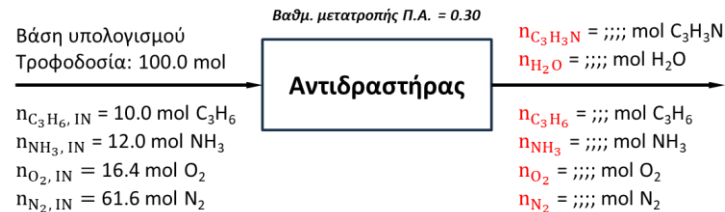
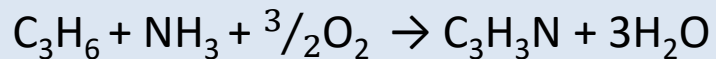
$$n_{\text{N}_2, \text{IN}} = 78 \text{ mol air} \cdot \left| \frac{0.79 \text{ mol N}_2}{1 \text{ mol air}} \right| = 61.6 \text{ mol N}_2$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 7**Βήμα 2:**

Διάγραμμα ροής
(επικαιροποιημένο)



ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 7



Βήμα 3:

(α) Περιοριστικό αντιδρών (1ος τρόπος)

$$\left(\frac{n_{\text{NH}_3}}{n_{\text{C}_3\text{H}_6}} \right)_{\text{ΣΤΟΙΧ}} = \frac{1}{1} = 1.0$$

$$\left(\frac{n_{\text{NH}_3}}{n_{\text{C}_3\text{H}_6}} \right)_{\text{IN}} = \frac{12}{10} = 1.2$$

$$\left(\frac{n_{\text{O}_2}}{n_{\text{C}_3\text{H}_6}} \right)_{\text{ΣΤΟΙΧ}} = \frac{3/2}{1} = 1.5$$

$$\left(\frac{n_{\text{O}_2}}{n_{\text{C}_3\text{H}_6}} \right)_{\text{IN}} = \frac{16.4}{10} = 1.64$$

$1.2 (\text{IN}) > 1.0 (\text{ΣΤΟΙΧ}) \Rightarrow \text{NH}_3$ σε περίσσεια

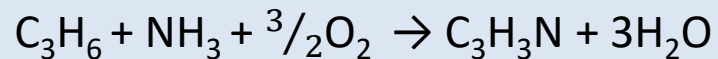


Περιοριστικό αντιδρών είναι το **προπυλένιο C_3H_6**



$1.64 (\text{IN}) > 1.5 (\text{ΣΤΟΙΧ}) \Rightarrow \text{O}_2$ σε περίσσεια

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 7



Βήμα 3:

(α) Περιοριστικό αντιδρών (2ος τρόπος)

ΕΙΣΡΟΗ + ΠΑΡΑΓΩΓΗ =

ΕΚΡΟΗ

+ ΚΑΤΑΝΑΛΩΣΗ

$$n_i = n_{i,0} \pm \nu_i \cdot \xi$$

$$\xi_{\max, \text{NH}_3} = \frac{0 - 12.0}{-1} = 12.0$$

$$\xi_{\max, \text{O}_2} = \frac{0 - 16.4}{-1.5} = 10.9$$

$$\xi_{\max, \text{C}_3\text{H}_6} = \frac{0 - 10.0}{-1} = 10.0$$

Βάση υπολογισμού
Τροφοδοσία: 100.0 mol

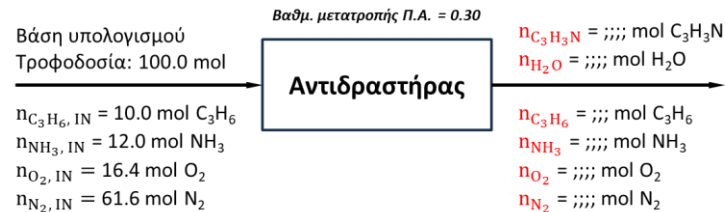
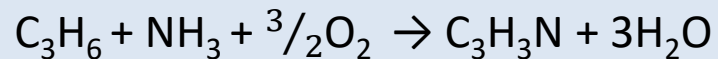
$n_{\text{C}_3\text{H}_6, \text{IN}} = 10.0 \text{ mol C}_3\text{H}_6$
 $n_{\text{NH}_3, \text{IN}} = 12.0 \text{ mol NH}_3$
 $n_{\text{O}_2, \text{IN}} = 16.4 \text{ mol O}_2$
 $n_{\text{N}_2, \text{IN}} = 61.6 \text{ mol N}_2$

Βαθμ. μετατροπής Π.Α. = 0.30

Αντιδραστήρας

$n_{\text{C}_3\text{H}_3\text{N}} = ;;; \text{ mol C}_3\text{H}_3\text{N}$
 $n_{\text{H}_2\text{O}} = ;;; \text{ mol H}_2\text{O}$
 $n_{\text{C}_3\text{H}_6} = ;;; \text{ mol C}_3\text{H}_6$
 $n_{\text{NH}_3} = ;;; \text{ mol NH}_3$
 $n_{\text{O}_2} = ;;; \text{ mol O}_2$
 $n_{\text{N}_2} = ;;; \text{ mol N}_2$

Περιοριστικό αντιδρών αυτό με το μικρότερο $\xi_{\max}$ δηλαδή το προπυλένιο C_3H_6

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 7**Βήμα 4:**

(β) Περίσσεια των υπολοίπων αντιδρώντων

Αφού το Π.Α. είναι το προπυλένιο C_3H_6 , τότε, όπως είδαμε (1^{ος} τρόπος) το O_2 και NH_3 είναι σε περίσσεια:

$$\% \text{ περίσσεια αντιδρ.} = \frac{n_{\text{A,τροφ.}} - n_{\text{A,στοιχ.}}}{n_{\text{A,στοιχ.}}} \quad (1)$$

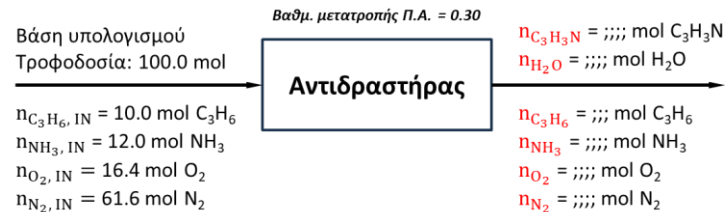
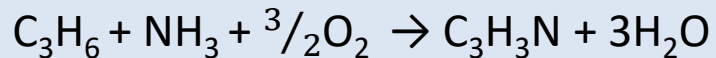
$$\left[\begin{aligned} n_{\text{NH}_3, \text{στοιχ.}} &= 10.0 \text{ mol C}_3\text{H}_6 \cdot \left| \frac{1 \text{ mol NH}_3}{1 \text{ mol C}_3\text{H}_6} \right| = 10.0 \text{ mol NH}_3 \\ n_{\text{O}_2, \text{στοιχ.}} &= 10.0 \text{ mol C}_3\text{H}_6 \cdot \left| \frac{\frac{3}{2} \text{ mol O}_2}{1 \text{ mol C}_3\text{H}_6} \right| = 15.0 \text{ mol O}_2 \end{aligned} \right.$$

(1) $\Rightarrow$

$$\% \text{ περίσσεια NH}_3 = \frac{12.0 - 10.0}{10.0} = 20\% \quad \text{NH}_3$$

$$\% \text{ περίσσεια O}_2 = \frac{16.4 - 15.0}{15.0} = 9.3\% \quad \text{O}_2$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 7



Βήμα 5:

(γ) Σύσταση του προϊόντος (1^{ος} τρόπος με χρήση ξ)

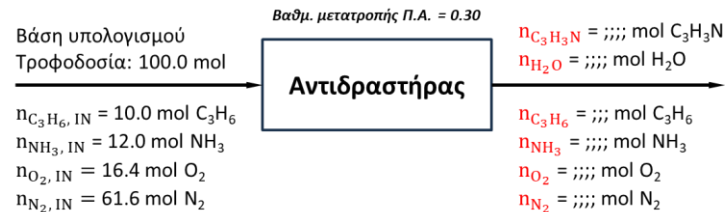
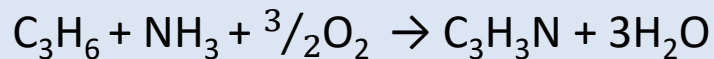
Έχει δοθεί ότι βαθμός μετατροπής Π.Α. (ήτοι του C_3H_6) είναι 30%, επομένως:

$$f = 0.3 = \frac{n_{\text{C}_3\text{H}_6, \text{αντιδρ.}}}{n_{\text{C}_3\text{H}_6, \text{τροφοδ.}}} = \frac{n_{\text{C}_3\text{H}_6, \text{τροφοδ.}} - n_{\text{C}_3\text{H}_6, \text{out}}}{n_{\text{C}_3\text{H}_6, \text{τροφοδ.}}} = \frac{10.0 - n_{\text{C}_3\text{H}_6, \text{out}}}{10.0} \Rightarrow n_{\text{C}_3\text{H}_6, \text{out}} = 7.0 \text{ mol}$$

Υπολογισμός ξ

$$n_i = n_{i,0} \pm \nu_i \cdot \xi \Rightarrow n_{\text{C}_3\text{H}_6, \text{out}} = n_{\text{C}_3\text{H}_6, \text{τροφοδ.}} - 1 \cdot \xi \Rightarrow 7.0 = 10.0 - \xi \Rightarrow \xi = 3.0 \text{ mol}$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 7



Βήμα 5:

(γ) Σύσταση του προϊόντος (1^{ος} τρόπος με χρήση ξ)

Χρήση ξ (=3.0 mol) για τις υπόλοιπες ενώσεις και στοιχεία του προϊόντος

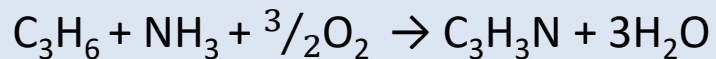
$$n_i = n_{i,0} \pm \nu_i \cdot \xi$$

$$\begin{aligned}
 n_{\text{NH}_3, \text{out}} &= n_{\text{NH}_3, \text{τροφοδ.}} - 1 \cdot \xi = 12 - 1 \cdot 3 & \Rightarrow n_{\text{NH}_3, \text{out}} &= 9.0 \text{ mol} \Rightarrow y_{\text{NH}_3} = \frac{9}{101.5} = 8.9 \% \\
 n_{\text{O}_2, \text{out}} &= n_{\text{O}_2, \text{τροφοδ.}} - 1.5 \cdot \xi = 16.4 - 1.5 \cdot 3 & \Rightarrow n_{\text{O}_2, \text{out}} &= 11.9 \text{ mol} \Rightarrow y_{\text{O}_2} = \frac{11.9}{101.5} = 11.7 \% \\
 n_{\text{N}_2, \text{out}} &= n_{\text{N}_2, \text{τροφοδ.}} - 0 \cdot \xi & \Rightarrow n_{\text{N}_2, \text{out}} &= 61.6 \text{ mol} \Rightarrow y_{\text{N}_2} = \frac{61.6}{101.5} = 60.7 \% \\
 n_{\text{C}_3\text{H}_3\text{N}, \text{out}} &= n_{\text{C}_3\text{H}_3\text{N}, \text{τροφοδ.}} + 1 \cdot \xi = 0 + 1 \cdot 3 & \Rightarrow n_{\text{C}_3\text{H}_3\text{N}, \text{out}} &= 3.0 \text{ mol} \Rightarrow y_{\text{C}_3\text{H}_3\text{N}} = \frac{3}{101.5} = 2.9 \% \\
 n_{\text{H}_2\text{O}, \text{out}} &= n_{\text{H}_2\text{O}, \text{τροφοδ.}} + 3 \cdot \xi = 0 + 3 \cdot 3 & \Rightarrow n_{\text{H}_2\text{O}, \text{out}} &= 9.0 \text{ mol} \Rightarrow y_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{9}{101.5} = 8.9 \% \\
 & & n_{\text{C}_3\text{H}_6, \text{out}} &= 7.0 \text{ mol} \Rightarrow y_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{7}{101.5} = 6.9 \%
 \end{aligned}$$

$$\Sigma_{\text{ni}} = 101.5 \text{ mol}$$

$$100.0 \%$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 7

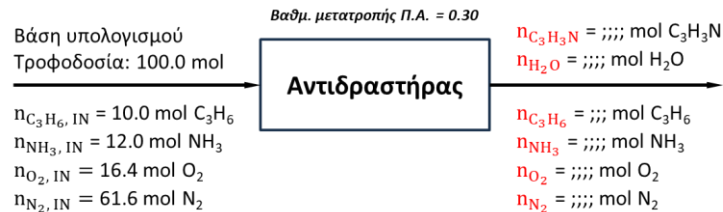


Βήμα 5:

(γ) Σύσταση του προϊόντος (2^{ος} τρόπος με ισοζύγια μάζας)

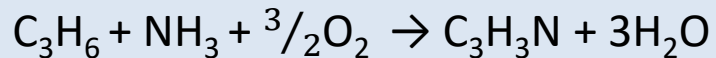
$$\text{ΕΙΣΡΟΗ} + \text{ΠΑΡΑΓΩΓΗ} = \text{ΕΚΡΟΗ} + \text{ΚΑΤΑΝΑΛΩΣΗ}$$

$$\begin{array}{llll} \text{C}_3\text{H}_6 & 10.0 + 0 = n_{\text{C}_3\text{H}_6, \text{out}} + f \cdot 10 & \xRightarrow{f=0.3} & n_{\text{C}_3\text{H}_6, \text{out}} = 7 \text{ mol} \\ \text{NH}_3 & 12.0 + 0 = n_{\text{NH}_3, \text{out}} + 0.3 \cdot 10 \cdot \left| \frac{1 \text{ mol NH}_3}{1 \text{ mol C}_3\text{H}_6} \right| & \Rightarrow & n_{\text{NH}_3, \text{out}} = 9 \text{ mol} \\ \text{O}_2 & 16.4 + 0 = n_{\text{O}_2, \text{out}} + 0.3 \cdot 10 \cdot \left| \frac{\frac{3}{2} \text{ mol O}_2}{1 \text{ mol C}_3\text{H}_6} \right| & \Rightarrow & n_{\text{O}_2, \text{out}} = 11.9 \text{ mol} \\ \text{N}_2 & 61.6 + 0 = n_{\text{N}_2, \text{out}} + 0 & \Rightarrow & n_{\text{N}_2, \text{out}} = 61.6 \text{ mol} \\ \text{C}_3\text{H}_3\text{N} & 0 + 0.3 \cdot 10 \cdot \left| \frac{1 \text{ mol C}_3\text{H}_3\text{N}}{1 \text{ mol C}_3\text{H}_6} \right| = n_{\text{C}_3\text{H}_3\text{N}, \text{out}} + 0 & \Rightarrow & n_{\text{C}_3\text{H}_3\text{N}, \text{out}} = 3.0 \text{ mol} \\ \text{H}_2\text{O} & 0 + 0.3 \cdot 10 \cdot \left| \frac{3 \text{ mol H}_2\text{O}}{1 \text{ mol C}_3\text{H}_6} \right| = n_{\text{H}_2\text{O}, \text{out}} + 0 & \Rightarrow & n_{\text{H}_2\text{O}, \text{out}} = 9.0 \text{ mol} \end{array}$$



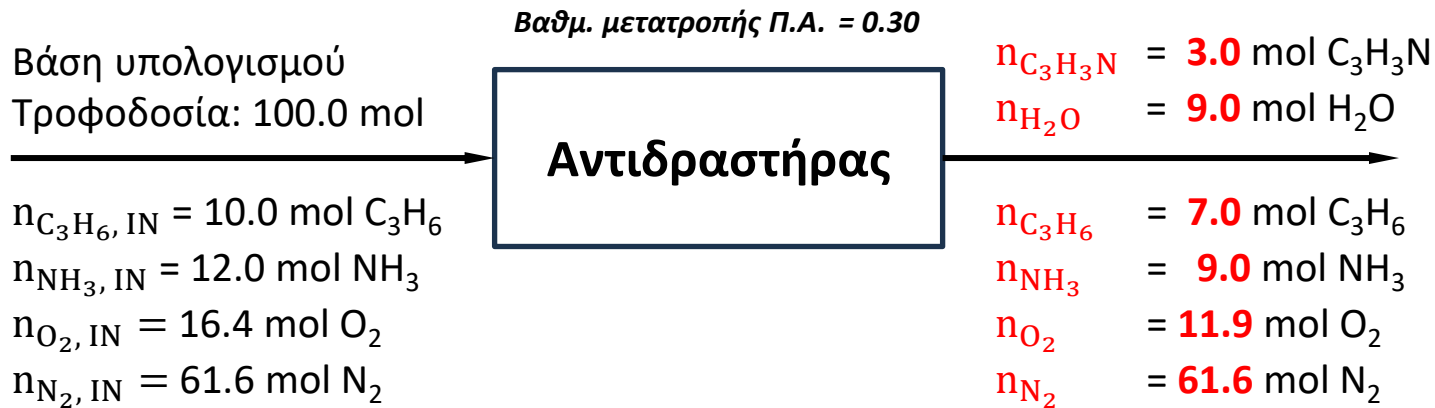
Ομοίως, όπως προηγουμένως, υπολογίζονται τα y_i

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 7



Βήμα 6:

Διάγραμμα ροής (με υπολογισμένες τιμές)

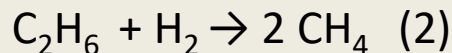
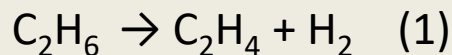


Περιοριστικό αντιδρών:	C_3H_6
Περίσσεια NH_3 :	20 %
Περίσσεια O_2 (αέρα):	9.3%
Σύσταση προϊόντος (mol %):	C_3H_6 : 6.9, NH_3 : 8.9, O_2 : 11.7, N_2 : 60.7, $\text{C}_3\text{H}_3\text{N}$: 2.9, H_2O : 8.9

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 8



Οι παρακάτω αντιδράσεις γίνονται σε αντιδραστήρα συνεχούς λειτουργίας, μόνιμης κατάστασης.



Η τροφοδοσία περιλαμβάνει 85.0 mol % αιθάνιο (C_2H_6) και 15 mol % αδρανή (I). Ο βαθμός μετατροπής του αιθανίου είναι 0.501 και η απόδοση σε αιθυλένιο (mol C_2H_4 / mol C_2H_6) 0.471.

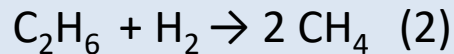
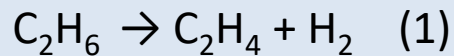
Υπολογίστε τη μοριακή σύσταση του προϊόντος και την εκλεκτικότητα του αιθυλενίου ως προς το μεθάνιο (CH_4).

Hint:

- Πλέον έχει καταστεί σαφές ότι δεν χρειάζεται πανικός, *life is short*
- Προσοχή, το H_2 δεν είναι διαθέσιμο από την αρχή, αλλά παράγεται μέσω της αντίδρασης (1)
- Στο «προϊόν» θα έχουμε σχεδόν τα πάντα, *think about it, ...* πάλι

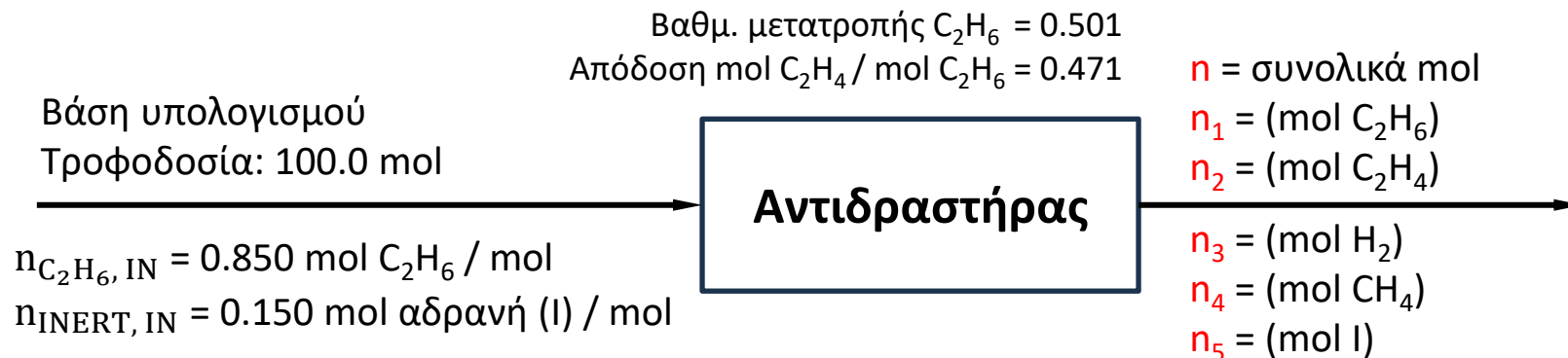


ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 8



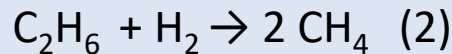
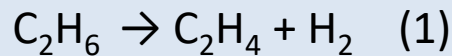
Βήμα 1:

Διάγραμμα ροής



ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 8

Βήμα 2:



Βάση υπολογισμού
Τροφοδοσία: 100.0 mol

$n_{\text{C}_2\text{H}_6, \text{IN}} = 0.850 \text{ mol C}_2\text{H}_6 / \text{mol}$
 $n_{\text{INERT, IN}} = 0.150 \text{ mol αδρανή (I) / mol}$

Βαθμ. μετατροπής $\text{C}_2\text{H}_6 = 0.501$
Απόδοση $\text{mol C}_2\text{H}_4 / \text{mol C}_2\text{H}_6 = 0.471$

Αντιδραστήρας

n = συνολικά mol
 n_1 = (mol C_2H_6)
 n_2 = (mol C_2H_4)
 n_3 = (mol H_2)
 n_4 = (mol CH_4)
 n_5 = (mol I)

Σύσταση προϊόντος με χρήση ξ

Προσοχή, όταν υπάρχουν περισσότερες της μιας αντιδράσεις,
έχουμε πολλαπλή παραγωγή/κατανάλωση κάποιων
συμμετεχόντων ενώσεων

$$n_i = n_{i,0} \pm \sum_{j=1}^2 v_{ij} \cdot \xi_j$$

Αν ξ_1 είναι η έκταση της πρώτης αντίδρασης και ξ_2 της δεύτερης, τότε:

$$n_1 \text{ (mol C}_2\text{H}_6\text{)} = 85 - 1 \cdot \xi_1 - 1 \cdot \xi_2 \quad (3)$$

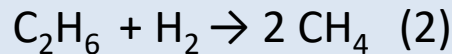
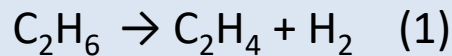
$$n_2 \text{ (mol C}_2\text{H}_4\text{)} = 0 + 1 \cdot \xi_1 \quad (4)$$

$$n_3 \text{ (mol H}_2\text{)} = 0 + 1 \cdot \xi_1 - 1 \cdot \xi_2 \quad (5)$$

$$n_4 \text{ (mol CH}_4\text{)} = 0 + 2 \cdot \xi_2 \quad (6)$$

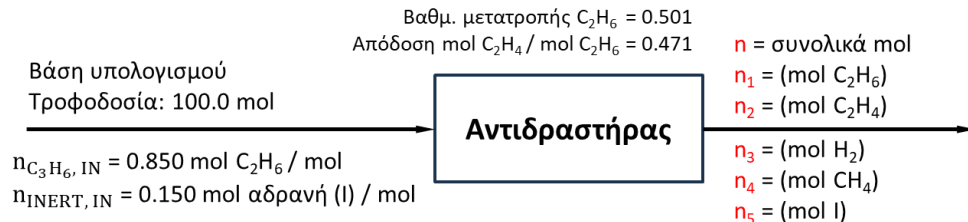
$$n_5 \text{ (mol I)} = 15.0$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 8



Βήμα 3:

Αξιοποίηση βαθμού μετατροπής



Βαθμός μετατροπής C_2H_6 : $f = 0.501 \Rightarrow$ το υπόλοιπο κλάσμα $(1 - 0.501)$ δεν αντέδρασε και βρίσκεται στην έξοδο!

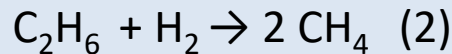
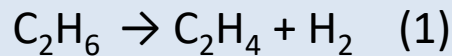
$$n_1 = \frac{(1-0.501)\text{mol C}_2\text{H}_6 \text{ που δεν αντεδρασαν}}{\text{mol C}_2\text{H}_6 \text{ τροφοδοσιας}} \cdot 85.0 \text{ mol C}_2\text{H}_6 \text{ τροφοδοσίας} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow n_1 = 42.4 \text{ mol C}_2\text{H}_6 \quad (7)$$

$$(3) \Rightarrow 42.4 = 85 - \xi_1 - \xi_2 \quad \Rightarrow$$

$$\xi_1 + \xi_2 = 42.6 \text{ mol} \quad (8)$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 8



Βήμα 4:

Αξιοποίηση βαθμού απόδοσης

Βάση υπολογισμού
Τροφοδοσία: 100.0 mol

$n_{\text{C}_2\text{H}_6, \text{IN}} = 0.850 \text{ mol C}_2\text{H}_6 / \text{mol}$
 $n_{\text{INERT, IN}} = 0.150 \text{ mol αδρανή (I) / mol}$

Βαθμ. μετατροπής $\text{C}_2\text{H}_6 = 0.501$
Απόδοση $\text{mol C}_2\text{H}_4 / \text{mol C}_2\text{H}_6 = 0.471$

Αντιδραστήρας

n = συνολικά mol
 $n_1 = (\text{mol C}_2\text{H}_6)$
 $n_2 = (\text{mol C}_2\text{H}_4)$
 $n_3 = (\text{mol H}_2)$
 $n_4 = (\text{mol CH}_4)$
 $n_5 = (\text{mol I})$

$$\text{Απόδοση} = \frac{\text{mol προϊόντος C}_2\text{H}_4}{\text{mol προϊόντος C}_2\text{H}_4 \text{ με 100\% μετατροπή του C}_2\text{H}_6} = 0.471 \quad (9)$$

$$n_2^* = 85.0 \text{ mol C}_2\text{H}_6 \text{ τροφοδοσίας} \cdot \frac{1 \text{ mol C}_2\text{H}_4}{1 \text{ mol C}_2\text{H}_6} \Rightarrow n_2^* = 85.0 \text{ mol}$$

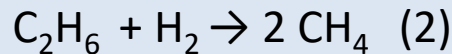
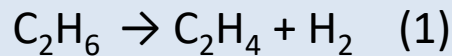
$$(9) \Rightarrow n_2 = 0.471 \cdot 85.0 = 40.0 \text{ mol C}_2\text{H}_4$$

$$(4) \Rightarrow n_2 = 40.0 = \xi_1 \Rightarrow \xi_1 = 40.0 \text{ mol}$$

$$\text{Ενώ από την (8)} \Rightarrow 40 + \xi_2 = 42.6 \text{ mol} \Rightarrow \xi_2 = 2.6 \text{ mol}$$



Μπορώ πλέον να
λύσω τις (3) έως (6)

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 8**Βήμα 5:**Υπολογισμός n_i εξόδουΈχοντας πλέον υπολογίσει $\xi_1 = 40.0 \text{ mol}$ και $\xi_2 = 2.6 \text{ mol}$ τότε:

$$(3) \ n_1 (\text{mol C}_2\text{H}_6) = 85 - \xi_1 - \xi_2 \quad \Rightarrow \quad n_1 = 42.4 \quad y_1 = 42.4 / 140 = 30.3 \%$$

$$(4) \ n_2 (\text{mol C}_2\text{H}_4) = \xi_1 \quad \Rightarrow \quad n_2 = 40.0 \quad y_2 = 28.6 \%$$

$$(5) \ n_3 (\text{mol H}_2) = \xi_1 - \xi_2 \quad \Rightarrow \quad n_3 = 37.4 \quad y_3 = 26.7 \%$$

$$(6) \ n_4 (\text{mol CH}_4) = 2 \cdot \xi_2 \quad \Rightarrow \quad n_4 = 5.2 \quad y_4 = 3.7 \%$$

$$n_5 (\text{mol Inert}) \quad \Rightarrow \quad n_5 = 15.0 \quad y_5 = 10.7 \%$$

$$\Sigma n_i = 140.0 \text{ mol} \quad 100.0 \%$$

Βάση υπολογισμού
Τροφοδοσία: 100.0 mol

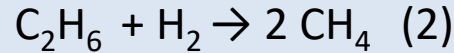
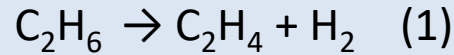
$n_{\text{C}_2\text{H}_6, \text{IN}} = 0.850 \text{ mol C}_2\text{H}_6 / \text{mol}$
 $n_{\text{INERT, IN}} = 0.150 \text{ mol αδρανή (I) / mol}$

Βαθμ. μετατροπής $\text{C}_2\text{H}_6 = 0.501$
Απόδοση $\text{mol C}_2\text{H}_4 / \text{mol C}_2\text{H}_6 = 0.471$

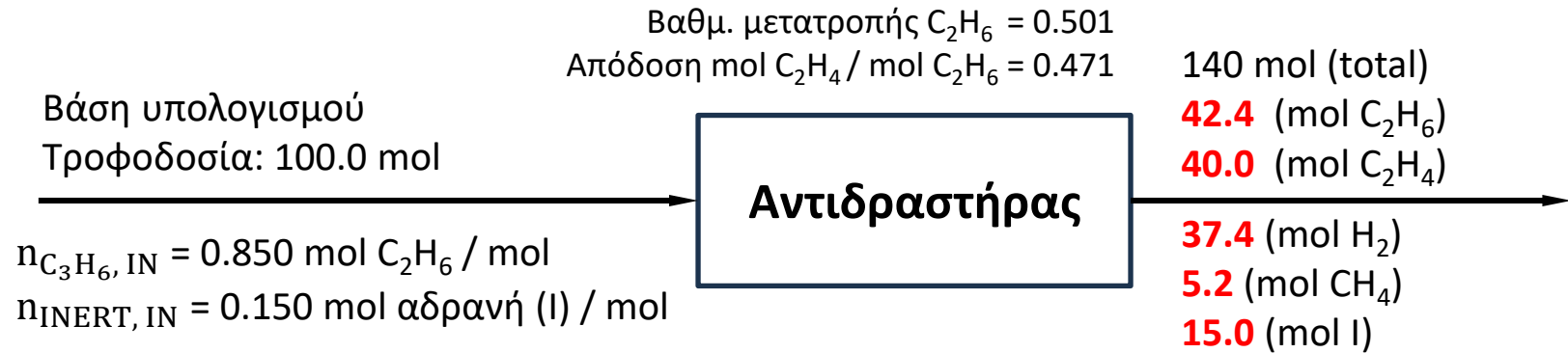
Αντιδραστήρας $n = \text{συνολικά mol}$ $n_1 = (\text{mol C}_2\text{H}_6)$ $n_2 = (\text{mol C}_2\text{H}_4)$ $n_3 = (\text{mol H}_2)$ $n_4 = (\text{mol CH}_4)$ $n_5 = (\text{mol I})$

$$\text{Εκλεκτικότητα} = \frac{\text{mol προϊόντος C}_2\text{H}_4}{\text{mol μη επιθυμητού προϊόντος CH}_4} = \frac{40}{5.2} = 7.7 \frac{\text{mol C}_2\text{H}_4}{\text{mol CH}_4}$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 8

Βήμα 6:

Ανακεφαλαίωση



Σύσταση προϊόντος (mol %): C_2H_6 : 30.3, C_2H_4 : 28.6, H_2 : 26.7, CH_4 : 3.7, Inert: 10.7

Εκλεκτικότητα C_2H_4 ως προς $\text{CH}_4 = 7.7 \frac{\text{mol C}_2\text{H}_4}{\text{mol CH}_4}$



ΠΕΡΙ ΙΣΟΖΥΓΙΩΝ

Ισοζύγιο μάζας χημικής ένωσης σε ΜΕΤΑΒΑΤΙΚΗ (μη μόνιμη) κατάσταση

$$\begin{array}{ccccccccc} \text{ΕΙΣΡΟΗ} & + & \text{ΠΑΡΑΓΩΓΗ} & - & \text{ΕΚΡΟΗ} & - & \text{ΚΑΤΑΝΑΛΩΣΗ} & = & \text{ΣΥΣΣΩΡΕΥΣΗ} \\ \text{Ρυθμός} & & \text{Ρυθμός} & & \text{Ρυθμός} & & \text{Ρυθμός} & & \text{Ρυθμός} \\ \text{εισόδου} & & \text{παραγωγής} & & \text{εξόδου} & & \text{κατανάλωσης} & & \text{συσσώρευσης} \\ \text{συστατικού} & & \text{συστατικού} & & \text{συστατικού} & & \text{συστατικού} & & \text{συστατικού} \\ \text{στο} & & \text{εντός του} & & \text{από το} & & \text{εντός του} & & \text{εντός του} \\ \text{σύστημα} & & \text{συστήματος} & & \text{σύστημα} & & \text{συστήματος} & & \text{συστήματος} \end{array}$$

Ισοζύγιο μάζας χημικής ένωσης σε ΜΟΝΙΜΗ κατάσταση

$$\text{ΕΙΣΡΟΗ} + \text{ΠΑΡΑΓΩΓΗ} - \text{ΕΚΡΟΗ} - \text{ΚΑΤΑΝΑΛΩΣΗ} = 0$$

Ισοζύγιο μάζας χημικού στοιχείου σε ΜΕΤΑΒΑΤΙΚΗ (μη μόνιμη) κατάσταση

ΕΙΣΡΟΗ

-

ΕΚΡΟΗ

=

ΣΥΣΣΩΡΕΥΣΗ

Ρυθμός
εισόδου
συστατικού
στο
σύστημα

Ρυθμός
εξόδου
συστατικού
από το
σύστημα

Ρυθμός
συσσώρευσης
συστατικού
εντός του
συστήματος

Προσοχή

Ισοζύγιο μάζας χημικού στοιχείου
μπορεί να γίνει σε **ΌΛΑ τα**
συστήματα σε moles ή kg
ανεξάρτητα αν στο σύστημα
πραγματοποιείται **χημική**
αντίδραση

ΕΙΣΡΟΗ

=

ΕΚΡΟΗ

Ισοζύγιο μάζας χημικού στοιχείου
σε ΜΟΝΙΜΗ κατάσταση

ΙΣΟΖΥΓΙΑ ΜΑΖΑΣ: ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΧΗΜΙΚΟΥ ΣΤΟΙΧΕΙΟΥ & ΧΗΜΙΚΗΣ ΕΝΩΣΗΣ

	ΙΣΧΥΕΙ ΕΙΣΡΟΗ = ΕΚΡΟΗ ;;;	
	Χωρίς χημική αντίδραση	Με χημική αντίδραση
	ΣΥΝΟΛΙΚΟ ΙΣΟΖΥΓΙΟ ΟΛΩΝ ΤΩΝ ΣΥΣΤΑΤΙΚΩΝ	
Μάζα	ΝΑΙ	ΝΑΙ
Μολ	ΝΑΙ	ΌΧΙ !!!!
	ΜΕΡΙΚΟ ΙΣΟΖΥΓΙΟ ΣΥΣΤΑΤΙΚΩΝ	
Μάζα χημικού στοιχείου	ΝΑΙ	ΝΑΙ
mol χημικού στοιχείου	ΝΑΙ	ΝΑΙ
Μάζα χημικής ένωσης	ΝΑΙ	ΌΧΙ !!!!
mol χημικής ένωσης	ΝΑΙ	ΌΧΙ !!!!



ΠΕΡΙ ΒΑΘΜΩΝ ΕΛΕΥΘΕΡΙΑΣ

ΒΑΘΜΟΙ ΕΛΕΥΘΕΡΙΑΣ ΑΝΑ ΕΙΔΟΣ ΑΝΑΛΥΣΗΣ

$BE \text{ ή } df = \text{Αρ. Αγνώστων} - \text{Αρ. Ανεξ. Εξισώσεων} - (\text{περιορισμοί \& σχέσεις})$

ΜΟΡΙΑΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ

Αρ. αγνώστων
μεταβλητών

Αρ. ανεξάρτητων χημικών
αντιδράσεων

Αρ. ισοζυγίων μάζας
μοριακών ειδών

Αρ. περιορισμών

ΑΤΟΜΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ

Αρ. αγνώστων
μεταβλητών

Αρ. ισοζυγίων μάζας
ατομικών ειδών

Αρ. ισοζυγίων μάζας
μη αντιδρώντων

Αρ. περιορισμών

ΕΚΤΑΣΗ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗΣ

Αρ. αγνώστων
μεταβλητών

Αρ. ανεξάρτητων χημικών
αντιδράσεων (αρ. ξ)

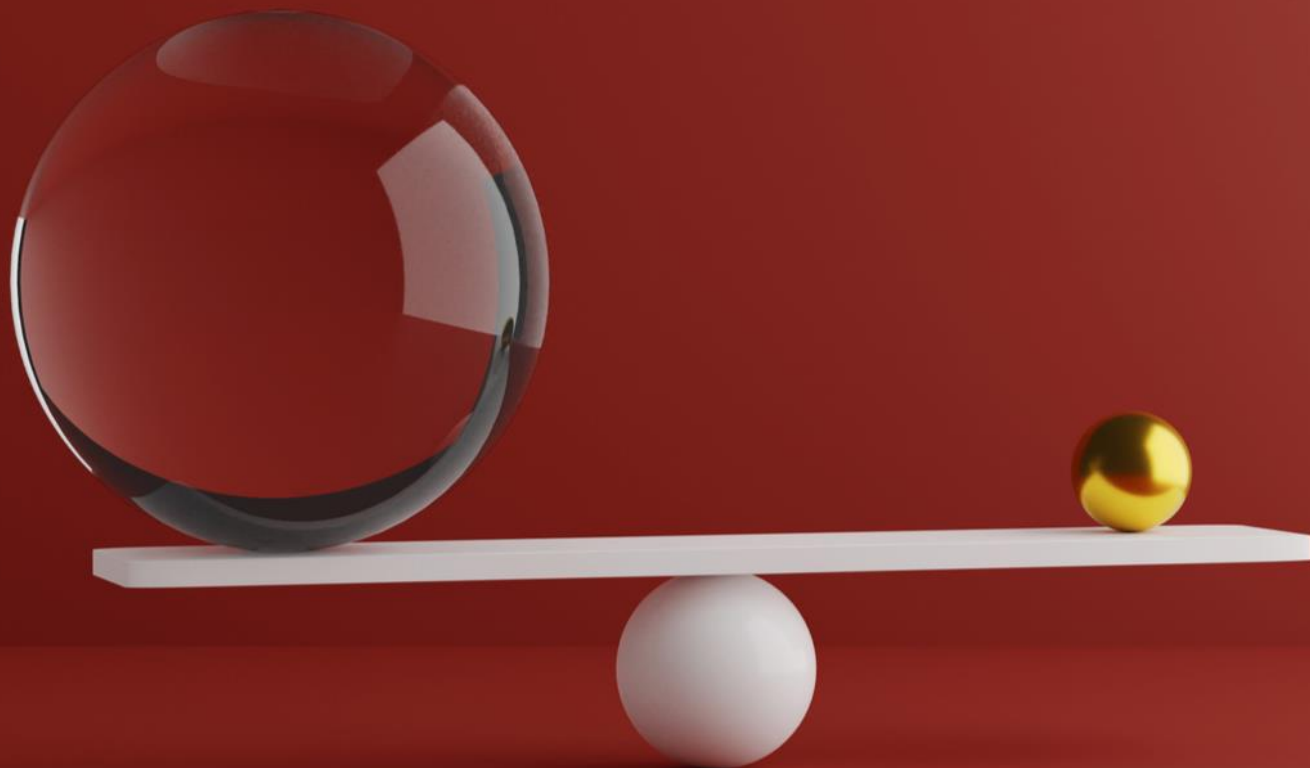
Αρ. εξισώσεων με
αντιδρώντα

Αρ. ισοζυγίων μάζας
μη αντιδρώντων

Αρ. περιορισμών

+

-



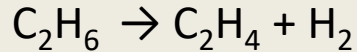
ΣΥΓΚΡΙΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ

ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΔΙΑΦΟΡΩΝ ΜΕΘΟΔΩΝ ΕΠΙΛΥΣΗΣ ΙΣΟΖΥΓΙΩΝ – 1 ΑΝΤΙΔΡΑΣΗ

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 9



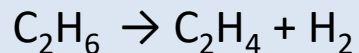
100 kmol/min **αιθάνιο** εισάγεται σε αντιδραστήρα αφυδρογόνωσης με στόχο την **παραγωγή αιθυλενίου**.



Η **ροή** H_2 στην έξοδο είναι 40 kmol/min.

Καθορίστε τους βαθμούς ελευθερίας και επιλύστε το ακόλουθο διάγραμμα ροής: α) με μοριακά ισοζύγια, β) με ατομικά ισοζύγια, γ) με χρήση της έκτασης της αντίδρασης

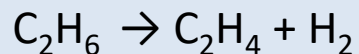


ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 9
 $100 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_6$
ΧΗΜΙΚΗ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗ
(Αντιδραστήρας)
 40 kmol/min H_2
 $\dot{n}_1 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_6$
 $\dot{n}_2 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_4$
Βήμα 1 ΜΟΡΙΑΚΗ ΒΑΣΗ:

Υπολογισμός βαθμών ελευθερίας

ΜΟΡΙΑΚΗ ΒΑΣΗ

+	Άγνωστες μεταβλητές	+	2 ($\dot{n}_1, \dot{n}_2$)
+	Ανεξάρτητες χημικές αντιδράσεις	+	1
-	Μοριακά ισοζύγια μάζας (αρ. διαφορετικών μορίων)	-	3 (C ₂ H ₆ , C ₂ H ₄ , H ₂)
-	Άλλες εξισώσεις και περιορισμοί	-	0
Βαθμοί ελευθερίας			+2 +1 -3 -0 = 0

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 9
 $100 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_6$
ΧΗΜΙΚΗ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗ
(Αντιδραστήρας)
 40 kmol/min H_2
 $\dot{n}_1 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_6$
 $\dot{n}_2 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_4$
Βήμα 1 ΜΟΡΙΑΚΗ ΒΑΣΗ:

Επίλυση μέσω μοριακών ισοζυγίων

ΕΙΣΡΟΗ

+

ΠΑΡΑΓΩΓΗ

-

ΕΚΡΟΗ

-

ΚΑΤΑΝΑΛΩΣΗ

=

0

$$\text{H}_2 \quad \cancel{\text{Εισ}} + \cancel{\text{Παρ}} - \cancel{\text{Εξ}} - \cancel{\text{Κατ}} = 0 \quad \Rightarrow \text{Παρ} = \text{Εξ} \quad \Rightarrow \dot{n}_{\text{H}_2, \text{παρ}} = 40 \text{ kmol/min} \quad (1)$$

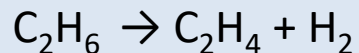
$$\text{C}_2\text{H}_6 \quad \cancel{\text{Εισ}} + \cancel{\text{Παρ}} - \text{Εξ} - \text{Κατ} = 0 \quad \Rightarrow \text{Εισ} = \text{Εξ} + \text{Κατ} \Rightarrow$$

$$100 \frac{\text{kmol C}_2\text{H}_6}{\text{min}} = \dot{n}_1 + 40 \frac{\text{kmol H}_2}{\text{min}} \cdot \frac{1 \text{ kmol C}_2\text{H}_6 \text{ κατ.}}{1 \text{ kmol H}_2 \text{ παρ.}} \Rightarrow 100 = \dot{n}_1 + 40$$

$$\Rightarrow \dot{n}_1 = 60 \frac{\text{kmol}}{\text{min}} \text{C}_2\text{H}_6$$

$$\text{C}_2\text{H}_4 \quad \cancel{\text{Εισ}} + \cancel{\text{Παρ}} - \cancel{\text{Εξ}} - \cancel{\text{Κατ}} = 0 \quad \Rightarrow \text{Παρ} = \text{Εξ} \Rightarrow 40 \frac{\text{kmol H}_2}{\text{min}} \cdot \frac{1 \text{ kmol C}_2\text{H}_4 \text{ παρ.}}{1 \text{ kmol H}_2 \text{ παρ.}} = \dot{n}_2$$

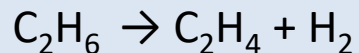
$$\Rightarrow \dot{n}_2 = 40 \frac{\text{kmol}}{\text{min}} \text{C}_2\text{H}_4$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 9
 $100 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_6$
ΧΗΜΙΚΗ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗ
(Αντιδραστήρας)
 40 kmol/min H_2
 $\dot{n}_1 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_6$
 $\dot{n}_2 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_4$
Βήμα 2 ΑΤΟΜΙΚΗ (ΣΤΟΙΧΕΙΑΚΗ) ΒΑΣΗ:

Υπολογισμός βαθμών ελευθερίας

ΑΤΟΜΙΚΗ (ΣΤΟΙΧΕΙΑΚΗ) ΒΑΣΗ

+	Άγνωστες μεταβλητές	+	2 ($\dot{n}_1, \dot{n}_2$)
-	Ατομικά ισοζύγια μάζας (αντιδρώντων συστατικών)	-	2 (C, H)
-	Ισοζύγια μη αντιδρώντων (αδρανών) συστατικών	-	0
-	Άλλες εξισώσεις και περιορισμοί	-	0
Βαθμοί ελευθερίας			+2 +2 -0 -0 = 0

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 9
 $100 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_6$
ΧΗΜΙΚΗ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗ
(Αντιδραστήρας)
 40 kmol/min H_2
 $\dot{n}_1 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_6$
 $\dot{n}_2 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_4$
Βήμα 2 ΑΤΟΜΙΚΗ (ΣΤΟΙΧΕΙΑΚΗ) ΑΝΑΛΥΣΗ:

Επίλυση μέσω ατομικών (στοιχειακών) ισοζυγίων

ΕΙΣΡΟΗ

=

ΕΚΡΟΗ

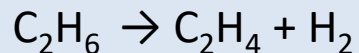
$$\text{C} \quad \overbrace{100 \frac{\text{kmol C}_2\text{H}_6}{\text{min}} \cdot \frac{2 \text{ kmol C.}}{1 \text{ kmol C}_2\text{H}_6}}^{\text{στην εισροή C}_2\text{H}_6} = \overbrace{\dot{n}_1 \cdot \frac{2}{1} + \dot{n}_2 \cdot \frac{2}{1}}^{\text{στην εκροή C}_2\text{H}_6} \Rightarrow 100 = \dot{n}_1 + \dot{n}_2 \quad (1)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{στην εκροή C}_2\text{H}_4}$

$$\text{H} \quad \overbrace{100 \frac{\text{kmol C}_2\text{H}_6}{\text{min}} \cdot \frac{6 \text{ kmol H.}}{1 \text{ kmol C}_2\text{H}_6}}^{\text{στην εισροή C}_2\text{H}_6} = \underbrace{40 \cdot \frac{2}{1}}_{\text{στην εκροή H}_2} + \overbrace{\dot{n}_1 \cdot \frac{6}{1} + \dot{n}_2 \cdot \frac{4}{1}}^{\text{στην εκροή C}_2\text{H}_6} \Rightarrow 600 = 80 + 6 \cdot \dot{n}_1 + 4 \cdot \dot{n}_2 \quad (2)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{στην εκροή C}_2\text{H}_4}$

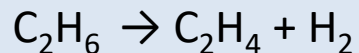
$$(1), (2) \quad \dot{n}_1 = 60 \frac{\text{kmol}}{\text{min}} \text{C}_2\text{H}_6 \quad \dot{n}_2 = 40 \frac{\text{kmol}}{\text{min}} \text{C}_2\text{H}_4$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 9
 $100 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_6$
ΧΗΜΙΚΗ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗ
(Αντιδραστήρας)
 40 kmol/min H_2
 $\dot{n}_1 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_6$
 $\dot{n}_2 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_4$
Βήμα 3 ΑΝΑΛΥΣΗ με βάση την ΕΚΤΑΣΗ της ΑΝΤΙΔΡΑΣΗΣ:

Υπολογισμός βαθμών ελευθερίας

ΑΤΟΜΙΚΗ (ΣΤΟΙΧΕΙΑΚΗ) ΒΑΣΗ

+	Άγνωστες μεταβλητές	+	2 ($\dot{n}_1, \dot{n}_2$)
+	Αριθμός ανεξάρτητων χημικών αντιδράσεων (αριθμός ξ)	+	1
	Αριθμός αντιδρώντων (συμμετέχουν στην αντίδραση)	-	3 (C ₂ H ₆ , C ₂ H ₄ , H ₂)
-	Αριθμός μη αντιδρώντων (αδρανών) συστατικών	-	0
-	Άλλες εξισώσεις και περιορισμοί	-	0
Βαθμοί ελευθερίας			+2 +1 -3 -0 -0 = 0

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 9
 $100 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_6$
ΧΗΜΙΚΗ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗ
(Αντιδραστήρας)
 40 kmol/min H_2
 $\dot{n}_1 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_6$
 $\dot{n}_2 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_4$
Βήμα 3 ΑΝΑΛΥΣΗ με βάση την ΕΚΤΑΣΗ της ΑΝΤΙΔΡΑΣΗΣ:

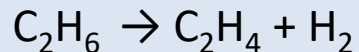
Υπολογισμός βαθμών ελευθερίας

 Εξισώσεις με ξ , $n_i = n_{i,0} \pm \nu_i \cdot \xi$

$$\text{H}_2: \quad 40 = 0 + 1 \cdot \xi \quad \Rightarrow \xi = 40 \text{ kmol/min}$$

$$\text{C}_2\text{H}_6 \quad \dot{n}_1 = 100 - 1 \cdot \xi \quad \xRightarrow{\xi=40} \quad \dot{n}_1 = 60 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_6$$

$$\text{C}_2\text{H}_4 \quad \dot{n}_2 = 0 + 1 \cdot \xi \quad \xRightarrow{\xi=40} \quad \dot{n}_2 = 40 \text{ kmol/min C}_2\text{H}_6$$

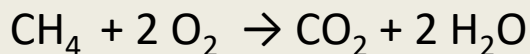
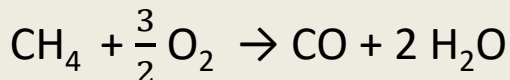
ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 9**Βήμα 4 ΣΧΟΛΙΑΣΜΟΣ ΜΕΘΟΔΩΝ ΕΠΙΛΥΣΗΣ ΙΣΟΖΥΓΙΩΝ:**

ΜΕΘΟΔΟΣ ΕΠΙΛΥΣΗΣ ΙΣΟΖΥΓΙΩΝ	ΠΛΕΟΝΕΚΤΗΜΑΤΑ / ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΙ
Ατομική βάση	Συνήθως η 1 ^η μας επιλογή
Έκταση αντίδρασης (ξ)	Πολύ καλό εργαλείο επίλυσης
Μοριακή βάση	Πιο σύνθετοι υπολογισμοί. Μόνο για απλά συστήματα μιας αντίδρασης

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 10



Μεθάνιο καίγεται με αέρα σε αντιδραστήρα **συνεχούς λειτουργίας και μόνιμης κατάστασης**.



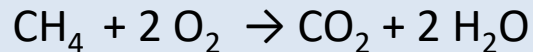
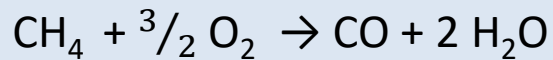
- Σύσταση τροφοδοσίας: 7.80% mol CH_4 , 19.4% O_2 και 72.8% N_2 .
- Βαθμός μετατροπής μεθανίου: 90.0%.
- Στο προϊόν ισχύει: $(\text{mol CO}_2)/(\text{mol CO}) = 8.0$

Έχοντας ως **βάση υπολογισμού 100 mol τροφοδοσία**:

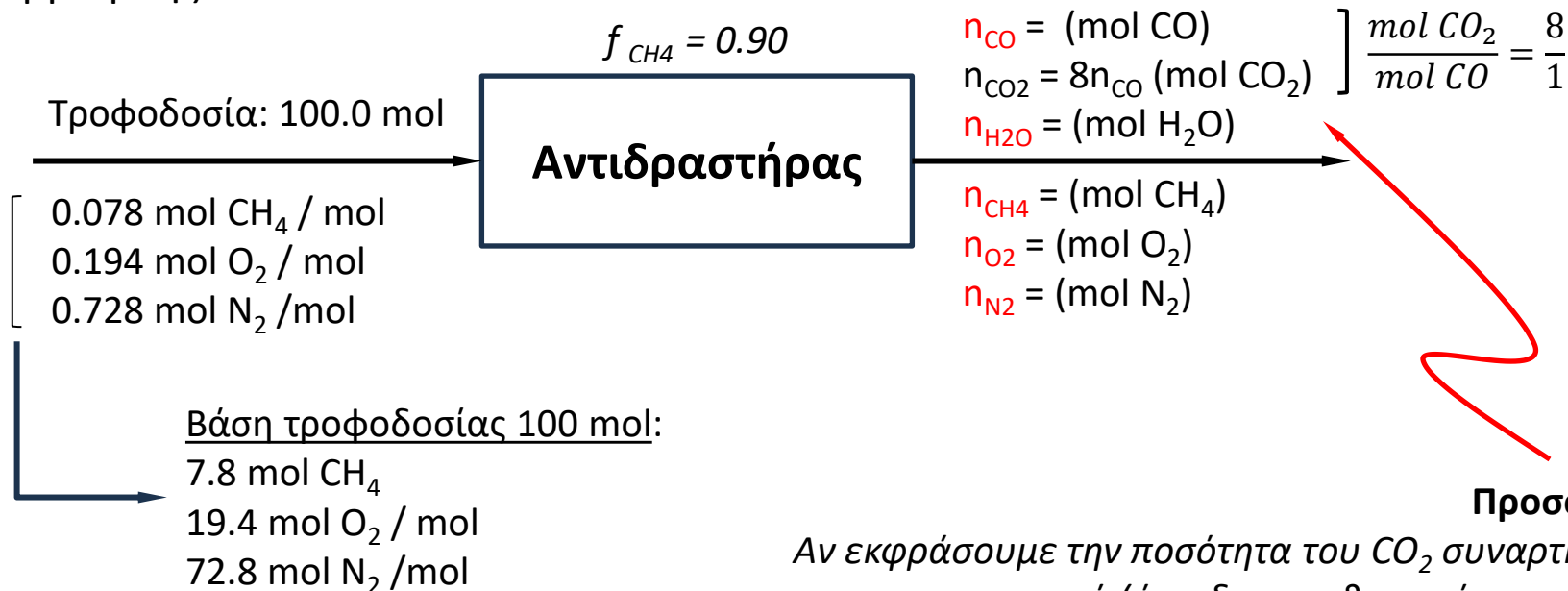
Καθορίστε τους βαθμούς ελευθερίας και επιλύστε το σχετικό διάγραμμα ροής: α) με μοριακά ισοζύγια, β) με ατομικά ισοζύγια και γ) με χρήση της έκτασης της αντίδρασης

Ποια είναι η **μολαρική σύσταση του προϊόντος/εξόδου/καυσαερίων**.



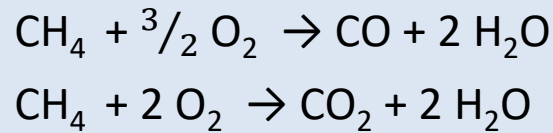
ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 10**Βήμα 1:**

Διάγραμμα ροής

**Προσοχή:**

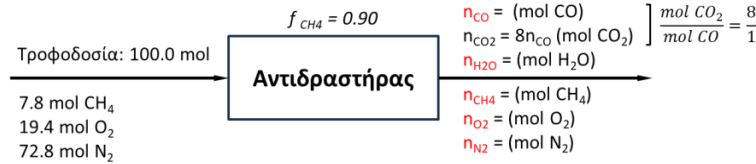
Αν εκφράσουμε την ποσότητα του CO₂ συναρτήσει του περιορισμού (άρα δεν την θεωρούμε ως νέα άγνωστη μεταβλητή), τότε έχουμε «χρησιμοποιήσει τον περιορισμό, άρα δεν θα τον προσμετρήσουμε

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 10



Βήμα 2:

Βαθμοί ελευθερίας



BE ή df = Αρ. Αγνώστων – Αρ. Ανεξ. Εξισώσεων – (περιορισμοί & σχέσεις)

ΜΟΡΙΑΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ	ΑΤΟΜΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ	ΕΚΤΑΣΗ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗΣ
Αρ. αγνώστων μεταβλητών	Αρ. αγνώστων μεταβλητών	Αρ. αγνώστων μεταβλητών
Αρ. ανεξάρτητων χημικών αντιδράσεων		Αρ. ανεξάρτητων χημικών αντιδράσεων (αρ. ξ)
Αρ. ισοζυγίων μάζας μοριακών ειδών	Αρ. ισοζυγίων μάζας ατομικών ειδών	Αρ. εξισώσεων με αντιδρώντα
	Αρ. ισοζυγίων μάζας μη αντιδρώντων	Αρ. ισοζυγίων μάζας μη αντιδρώντων
Αρ. περιορισμών	Αρ. περιορισμών	Αρ. περιορισμών

Μοριακή βάση: $(n_{\text{CO}}, n_{\text{CO}_2}, n_{\text{H}_2\text{O}}, n_{\text{CH}_4}, n_{\text{O}_2}, n_{\text{N}_2})$ 6 χημ. είδη

6 άγνωστοι + 2 αντιδράσεις – 6 ισοζύγια μάζας – 2 περιορισμοί = 0

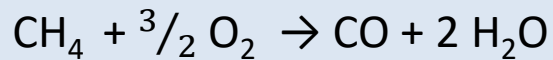
Ατομική ανάλυση: (C, H, O) (N)

6 άγνωστοι – 3 ισοζύγια μάζας – 1 μη αντιδρών – 2 περιορισμοί = 0

Έκταση: (ξ_1, ξ_2) $(\text{CH}_4, \text{O}_2, \text{CO}, \text{CO}_2, \text{H}_2\text{O})$ (N)

6 άγνωστοι + 2 αντιδράσεις – 5 ισοζύγια μάζας – 1 μη αντιδρών – 2 περιορισμοί = 0

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 10



Βήμα 3:

Αξιοποίηση περιορισμών και άλλων πληροφοριών

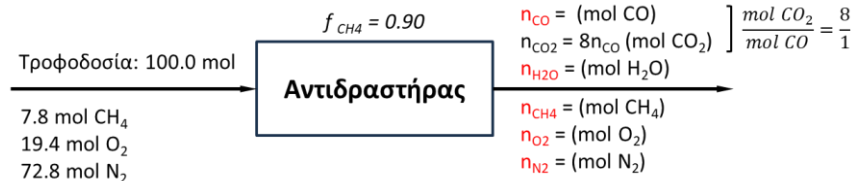
1. Βαθμός μετατροπής μεθανίου $f_{\text{CH}_4} = 0.90 \Rightarrow$

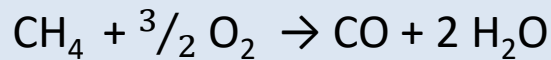
$$\frac{n_{\text{CH}_4, \text{τροφοδ.}} - n_{\text{CH}_4}}{n_{\text{CH}_4, \text{τροφοδ.}}} = \frac{7.80 - n_{\text{CH}_4}}{7.80} = 0.90 \Rightarrow n_{\text{CH}_4} = 0.78 \text{ mol}$$

2. Αναλογία CO_2 / CO

$$\frac{\text{mol CO}_2}{\text{mol CO}} = \frac{8}{1} \Rightarrow n_{\text{CO}_2} = 8 n_{\text{CO}}$$

3. Μη αντιδρών: $\Rightarrow n_{\text{N}_2} = 72.8 \text{ mol N}_2$

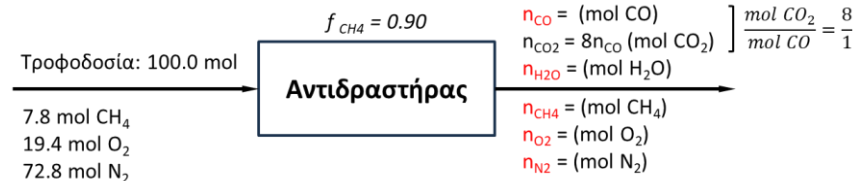


ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 10**Βήμα 4:**

Επίλυση μέσω μοριακών ισοζυγίων

$$\text{ΕΙΣΡΟΗ} + \text{ΠΑΡΑΓΩΓΗ} - \text{ΕΚΡΟΗ} - \text{ΚΑΤΑΝΑΛΩΣΗ} = 0$$

ΠΡΟΣΟΧΗ: ΠΑΡΑΓΩΓΗ & ΚΑΤΑΝΑΛΩΣΗ αναφέρονται σε όλες τις αντιδράσεις



$$\text{CH}_4: 7.80 + 0 = 0.78 + n_{\text{CH}_4, \text{R1}} + n_{\text{CH}_4, \text{R2}} \quad (1)$$

$$\Rightarrow n_{\text{CH}_4, \text{R1}} + n_{\text{CH}_4, \text{R2}} = 7.02 \quad (1^*)$$

όπου $n_{\text{CH}_4, \text{R1}}$ και $n_{\text{CH}_4, \text{R2}}$ είναι τα mol CH_4 που καταναλώθηκαν μέσω κάθε αντίδρασης

$$\text{O}_2: 19.4 + 0 = n_{\text{O}_2} + n_{\text{O}_2, \text{R1}} + n_{\text{O}_2, \text{R2}} \quad (2)$$

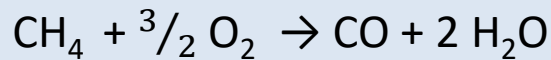
όπου $n_{\text{O}_2, \text{R1}}$ και $n_{\text{O}_2, \text{R2}}$ είναι τα mol του O_2 που αντέδρασαν μέσω κάθε αντίδρασης

Για να μη «γεμίζουμε» όμως αγνώστους, **μπορούμε να εκφράσουμε τα mol του O_2 που αντέδρασαν βάσει των αντίστοιχων mol CH_4 , ήτοι:**

$$19.4 = n_{\text{O}_2} + n_{\text{CH}_4, \text{R1}} \cdot \frac{\frac{3}{2} \text{ mol O}_2}{1 \text{ mol CH}_4} + n_{\text{CH}_4, \text{R2}} \cdot \frac{2 \text{ mol O}_2}{1 \text{ mol CH}_4} \quad \Rightarrow$$

$$19.4 = n_{\text{O}_2} + 1.5 \cdot n_{\text{CH}_4, \text{R1}} + 2 \cdot n_{\text{CH}_4, \text{R2}} \quad (2^*)$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 10

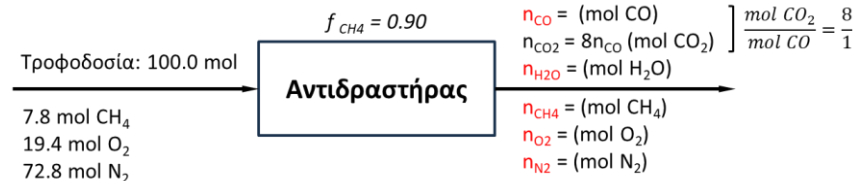


Βήμα 4:

Επίλυση μέσω μοριακών ισοζυγίων

$$\text{ΕΙΣΡΟΗ} + \text{ΠΑΡΑΓΩΓΗ} - \text{ΕΚΡΟΗ} - \text{ΚΑΤΑΝΑΛΩΣΗ} = 0$$

ΠΡΟΣΟΧΗ: ΠΑΡΑΓΩΓΗ & ΚΑΤΑΝΑΛΩΣΗ αναφέρονται σε όλες τις αντιδράσεις



$$\text{CO: } 0 + n_{\text{CO}, \text{P1}} = n_{\text{CO}} + 0 \quad (3)$$

όπου $n_{\text{CO}, \text{P1}}$ είναι τα mol CO που παρήχθησαν μέσω κάθε αντίδρασης

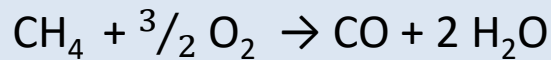
Όπως και προηγουμένως, όμως, **μπορούμε να εκφράσουμε τα mol του CO που παρήχθησαν βάσει των αντίστοιχων mol CH₄, ήτοι:**

$$n_{\text{CH}_4, \text{R1}} \cdot \frac{1 \text{ mol CO}}{1 \text{ mol CH}_4} = n_{\text{CO}} \Rightarrow n_{\text{CO}} = n_{\text{CH}_4, \text{R1}} \quad (3^*)$$

$$\text{CO}_2: 0 + n_{\text{CO}_2, \text{P2}} = n_{\text{CO}_2} + 0 \quad (4) \Rightarrow$$

$$n_{\text{CH}_4, \text{R2}} \cdot \frac{1 \text{ mol CO}_2}{1 \text{ mol CH}_4} = n_{\text{CO}_2} \Rightarrow n_{\text{CO}_2} = n_{\text{CH}_4, \text{R2}} \Rightarrow 8 n_{\text{CO}} = n_{\text{CH}_4, \text{R2}} \quad (4^*)$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 10

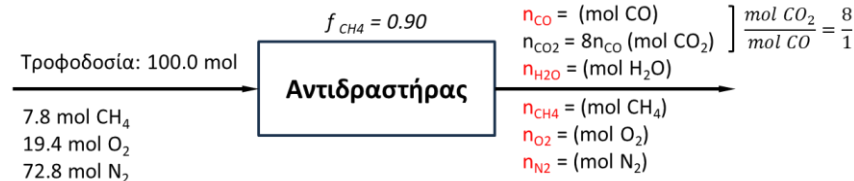


Βήμα 4:

Επίλυση μέσω μοριακών ισοζυγίων

$$\text{ΕΙΣΡΟΗ} + \text{ΠΑΡΑΓΩΓΗ} - \text{ΕΚΡΟΗ} - \text{ΚΑΤΑΝΑΛΩΣΗ} = 0$$

ΠΡΟΣΟΧΗ: ΠΑΡΑΓΩΓΗ & ΚΑΤΑΝΑΛΩΣΗ αναφέρονται σε όλες τις αντιδράσεις



$$\text{H}_2\text{O}: 0 + n_{\text{H}_2\text{O}, P1} + n_{\text{H}_2\text{O}, P2} = n_{\text{H}_2\text{O}} + 0 \quad (5)$$

όπου $n_{\text{H}_2\text{O}, P1}$ και $n_{\text{H}_2\text{O}, P2}$ είναι τα mol H₂O που παρήχθησαν μέσω κάθε αντίδρασης

$$n_{\text{CH}_4, R1} \cdot \frac{2 \text{ mol H}_2\text{O}}{1 \text{ mol CH}_4} + n_{\text{CH}_4, R2} \cdot \frac{2 \text{ mol H}_2\text{O}}{1 \text{ mol CH}_4} = n_{\text{H}_2\text{O}} \Rightarrow$$

$$n_{\text{H}_2\text{O}} = 2 \cdot n_{\text{CH}_4, R1} + 2 \cdot n_{\text{CH}_4, R2} \quad (5^*)$$

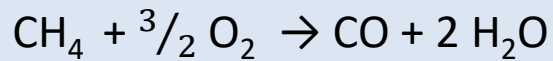
ΣΧΟΛΙΟ:

Δηλαδή, εκεί που είχαμε τρεις εναπομείναντες αγνώστους (n_{CO} , $n_{\text{H}_2\text{O}}$ και n_{O_2}) κάναμε τη ζωή μας πιο δύσκολη βάζοντας άλλους δύο ($n_{\text{CH}_4, R1}$ και $n_{\text{CH}_4, R2}$);

Απάντηση:

Περίπου, αλλά πλέον έχουμε 5 εξισώσεις, 5 αγνώστους, που λύνονται εύκολα

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 10



Βήμα 4:

Επίλυση μέσω μοριακών ισοζυγίων

$$n_{\text{CH}_4, \text{R1}} + n_{\text{CH}_4, \text{R2}} = 7.02 \quad (1^*)$$

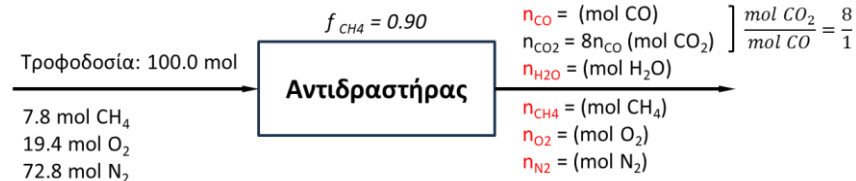
$$19.4 = n_{\text{O}_2} + 1.5 \cdot n_{\text{CH}_4, \text{R1}} + 2 \cdot n_{\text{CH}_4, \text{R2}} \quad (2^*)$$

$$n_{\text{CO}} = n_{\text{CH}_4, \text{R1}} \quad (3^*)$$

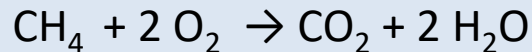
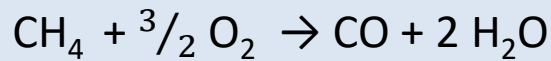
$$8 n_{\text{CO}} = n_{\text{CH}_4, \text{R2}} \quad (4^*)$$

$$n_{\text{H}_2\text{O}} = 2 \cdot n_{\text{CH}_4, \text{R1}} + 2 \cdot n_{\text{CH}_4, \text{R2}} \quad (5^*)$$

- Με αντικατάσταση (3*), (4*) στην (1*) $\Rightarrow n_{\text{CO}} + 8 n_{\text{CO}} = 7.02 \quad \Rightarrow n_{\text{CO}} = 0.78 \text{ mol}$
 $\Rightarrow n_{\text{CO}_2} = 6.24 \text{ mol}$
- (3*) $\Rightarrow n_{\text{CH}_4, \text{R1}} = 0.78 \text{ mol}$ και (4*) $n_{\text{CH}_4, \text{R2}} = 6.24 \text{ mol}$, άρα από (2*) $\Rightarrow n_{\text{O}_2} = 5.75 \text{ mol}$
- (5*) $\Rightarrow n_{\text{H}_2\text{O}} = 14.04 \text{ mol}$



ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 10



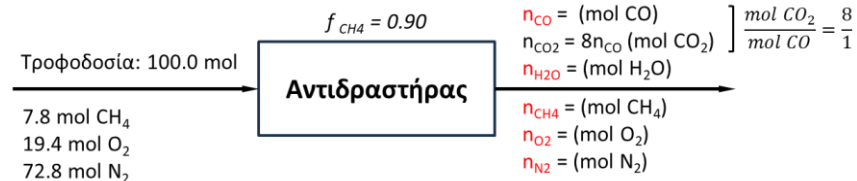
Βήμα 5:

Επίλυση μέσω ατομικών ισοζυγίων

ΕΙΣΡΟΗ

=

ΕΚΡΟΗ

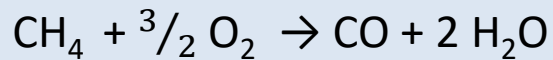


$$\begin{aligned} \text{C: } & \overbrace{7.80 \text{ mol CH}_4 \cdot \frac{1 \text{ mol C}}{1 \text{ mol CH}_4}}^{\text{C στο CH}_4 \text{ ΕΙΣ}} = \overbrace{0.78 \text{ mol CH}_4 \cdot \frac{1 \text{ mol C}}{1 \text{ mol CH}_4}}^{\text{C στο CH}_4 \text{ ΕΞΟΔ}} + \overbrace{n_{\text{CO}} \cdot \frac{1 \text{ mol C}}{1 \text{ mol CO}}}^{\text{C στο CO ΕΞΟΔ}} + \overbrace{n_{\text{CO}_2} \cdot \frac{1 \text{ mol C}}{1 \text{ mol CO}}}^{\text{C στο CO}_2 \text{ ΕΞΟΔ}} \Rightarrow \\ & 7.02 = n_{\text{CO}} + n_{\text{CO}_2} \quad (6) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{O: } & \overbrace{19.4 \text{ mol} \cdot \frac{2 \text{ mol O}}{1 \text{ mol O}_2}}^{\text{O}_2 \text{ ΕΙΣ}} = \overbrace{n_{\text{O}_2} \cdot \frac{2 \text{ mol O}}{1 \text{ mol O}_2}}^{\text{O}_2 \text{ ΕΞ}} + \overbrace{n_{\text{CO}} \cdot \frac{1 \text{ mol O}}{1 \text{ mol CO}}}^{\text{O στο CO ΕΞΟΔ}} + \overbrace{n_{\text{CO}_2} \cdot \frac{2 \text{ mol O}}{1 \text{ mol CO}}}^{\text{O στο CO}_2 \text{ ΕΞΟΔ}} + \overbrace{n_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \frac{1 \text{ mol O}}{1 \text{ mol H}_2\text{O}}}^{\text{O στο H}_2\text{O ΕΞΟΔ}} \Rightarrow \end{aligned}$$

$$38.8 = 2 \cdot n_{\text{O}_2} + n_{\text{CO}} + 2 \cdot n_{\text{CO}_2} + n_{\text{H}_2\text{O}} \quad (7)$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 10



Βήμα 5:

Επίλυση μέσω ατομικών ισοζυγίων

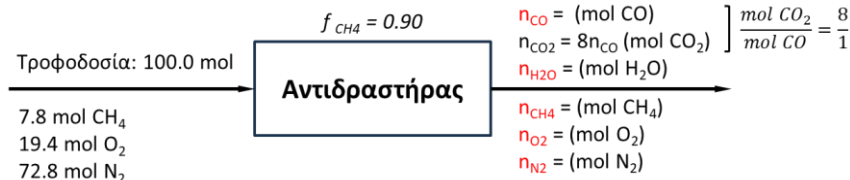
ΕΙΣΡΟΗ = ΕΚΡΟΗ

$$\text{H:} \quad \overbrace{7.80 \text{ mol CH}_4 \cdot \frac{4 \text{ mol H}}{1 \text{ mol CH}_4}}^{\text{H στο CH}_4 \text{ ΕΙΣ}} = \overbrace{0.78 \text{ mol CH}_4 \cdot \frac{4 \text{ mol H}}{1 \text{ mol CH}_4}}^{\text{H στο CH}_4 \text{ ΕΞΟΔ}} + \overbrace{n_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \frac{2 \text{ mol H}_2\text{O}}{1 \text{ mol H}_2\text{O}}}^{\text{H στο H}_2\text{O} \text{ ΕΞΟΔ}} \Rightarrow$$

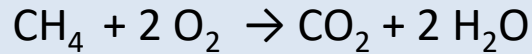
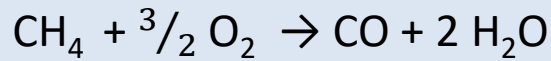
$$\Rightarrow n_{\text{H}_2\text{O}} = 14.04 \text{ mol}$$

Άρα, συνεχίζοντας την επίλυση:

- Από αναλογία $\text{CO}_2 / \text{CO} \Rightarrow n_{\text{CO}_2} = 8 \cdot n_{\text{CO}}$ επομένως, (6) $\Rightarrow n_{\text{CO}} = 0.78 \text{ mol}$ & $n_{\text{CO}_2} = 6.24 \text{ mol}$
- (7) $\Rightarrow n_{\text{O}_2} = 5.75 \text{ mol}$



ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 10



Βήμα 6:

με βάση την ΕΚΤΑΣΗ της ΑΝΤΙΔΡΑΣΗΣ:

$$n_i = n_{i,0} \pm \sum_{j=1}^2 \nu_{ij} \cdot \xi_j$$

$$\text{CH}_4: \quad 0.78 = 7.80 - 1 \cdot \xi_1 - 1 \cdot \xi_2 \quad \Rightarrow \quad \xi_1 + \xi_2 = 7.02 \text{ mol} \quad (8)$$

$$\text{O}_2: \quad n_{\text{O}_2} = 19.4 - \frac{3}{2} \cdot \xi_1 - 2 \cdot \xi_2 \quad (9)$$

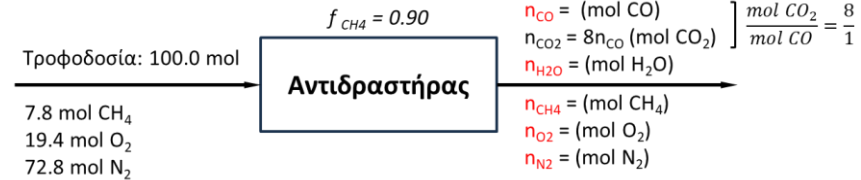
$$\text{CO}: \quad n_{\text{CO}} = 0 + 1 \cdot \xi_1 \quad \Rightarrow \quad n_{\text{CO}} = \xi_1 \quad (10)$$

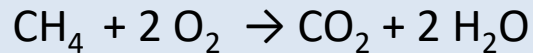
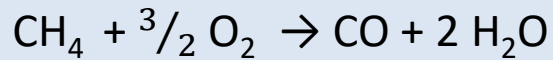
$$\text{CO}_2: \quad n_{\text{CO}_2} = 0 + 1 \cdot \xi_2 \quad \Rightarrow \quad n_{\text{CO}_2} = \xi_2 \quad (11)$$

$$\text{H}_2\text{O}: \quad n_{\text{H}_2\text{O}} = 0 + 2 \cdot \xi_1 + 2 \cdot \xi_2 \quad (12)$$

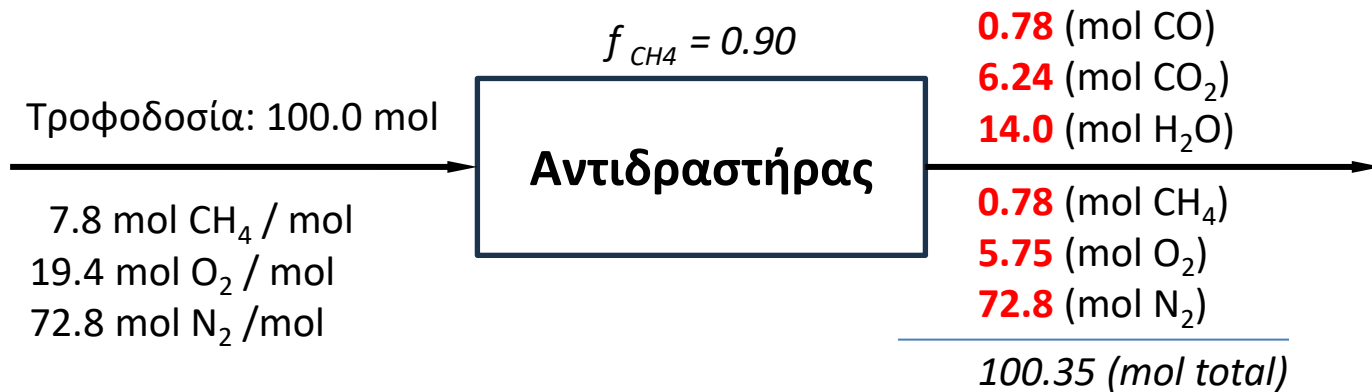
$$\text{Περιορισμός: } n_{\text{CO}_2} = 8 n_{\text{CO}} \quad (13)$$

- Αντικατάσταση (13), (11) και (10) στην (8) $\Rightarrow n_{\text{CO}} = 0.78 \text{ mol}$ και $n_{\text{CO}_2} = 6.24 \text{ mol}$
- Αντικατάσταση (10), (11) στην (9) $\Rightarrow n_{\text{O}_2} = 5.75 \text{ mol}$
- Αντικατάσταση (10), (11) στην (12) $\Rightarrow n_{\text{H}_2\text{O}} = 14.04 \text{ mol}$



ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 10**Βήμα 7:**

Σύνοψη και σύσταση προϊόντος



Σύσταση προϊόντος (mol %):

CH₄: 0.78

H₂O: 14

CO: 0.78

O₂: 5.7

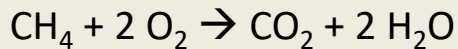
CO₂: 6.2

N₂: 72.5

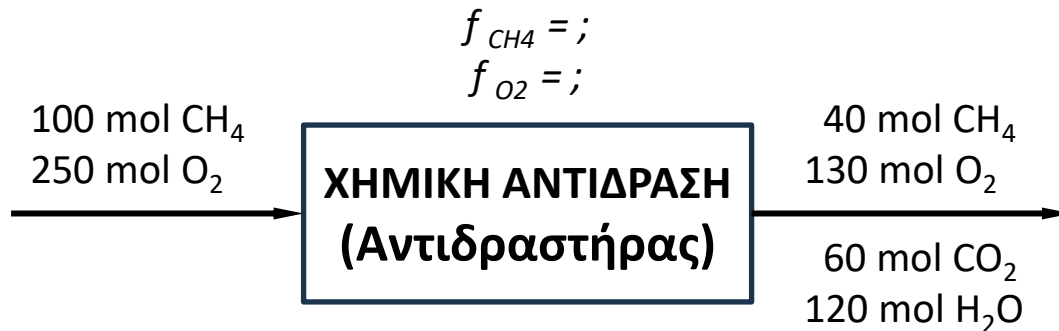
ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 11

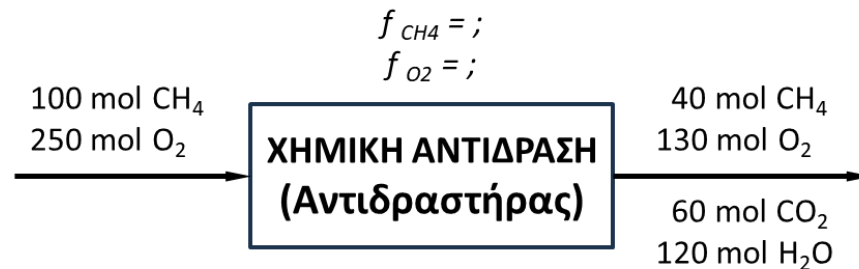
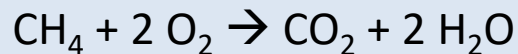


Δίνεται η ακόλουθη αντίδραση και διάγραμμα ροής:



1. Βαθμός μετατροπής μεθανίου = ;
2. Βαθμός μετατροπής οξυγόνου = ;
3. Καταστρώστε τις σχετικές εξισώσεις με βάση την έκταση της αντίδρασης ξ για τα CH_4 , O_2 , CO_2 και H_2O . Υπολογίστε το ξ .
4. Πόσα ανεξάρτητα ισοζύγια σε μοριακή βάση μπορούν να καταγραφούν;
5. Πόσα ανεξάρτητα ισοζύγια σε ατομική βάση μπορούν να καταγραφούν;
6. Να ελεγχθεί αν τα ισοζύγια C, H, O, O_2 είναι σωστά.
7. Περιεκτικότητα καυσαερίων σε CH_4 σε υγρή και σε ξηρή βάση:



ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 11

$$1. \quad f_{\text{CH}_4} = \frac{\text{mol}_{\text{reacted}}}{\text{mol}_{\text{fed}}} = \frac{100-40}{100} = 0.60$$

$$2. \quad f_{\text{O}_2} = \frac{\text{mol}_{\text{reacted}}}{\text{mol}_{\text{fed}}} = \frac{250-130}{250} = 0.48$$

$$3. \quad \text{Έκταση αντίδρασης: } n_i = n_{i,0} \pm \nu_i \cdot \xi$$

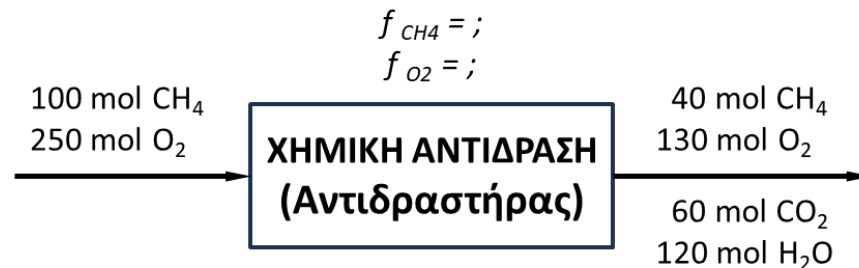
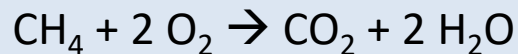
$$\text{CH}_4: \quad 40 = 100 - 1 \cdot \xi \quad \Rightarrow \xi = 60 \text{ mol}$$

$$\text{O}_2: \quad 130 = 250 - 2 \cdot \xi$$

$$\text{H}_2\text{O}: \quad 120 = 0 + 2 \cdot \xi$$

$$4. \quad \text{Ανεξάρτητα ισοζύγια σε } \underline{\text{μοριακή βάση}} = 4 \quad (\text{CH}_4, \text{O}_2, \text{CO}_2, \text{H}_2\text{O})$$

$$5. \quad \text{Ανεξάρτητα ισοζύγια σε } \underline{\text{ατομική βάση}} = 3 \quad (\text{C}, \text{H}, \text{O})$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 11

6. Έλεγχος ισοζυγίων (C, H, O, O₂):

$$\text{ΕΙΣΡΟΗ} + \text{ΠΑΡΑΓΩΓΗ} = \text{ΕΚΡΟΗ} + \text{ΚΑΤΑΝΑΛΩΣΗ}$$

C: $100 + 0 = 40 + 60$ ☑ OK

H: $4 \cdot 100 + 0 = 4 \cdot 40 + 2 \cdot 120$ ☑ OK

O: $2 \cdot 250 + 0 = 2 \cdot 130 + 2 \cdot 60 + 1 \cdot 120$ ☑ OK

O₂: $250 - 2 \cdot \xi = 130$ ☑ OK

7. Περιεκτικότητα καυσαερίων σε CH₄ σε υγρή και ξηρή βάση:

$$\text{Υγρή βάση} = \frac{\text{mol CH}_4}{\text{mol total συμπεριλ. H}_2\text{O}} = \frac{40}{40+130+60+120} = 11.4\%$$

$$\text{Ξηρή βάση} = \frac{\text{mol CH}_4}{\text{mol total ΧΩΡΙΣ H}_2\text{O}} = \frac{40}{40+130+60} = 17.4\%$$



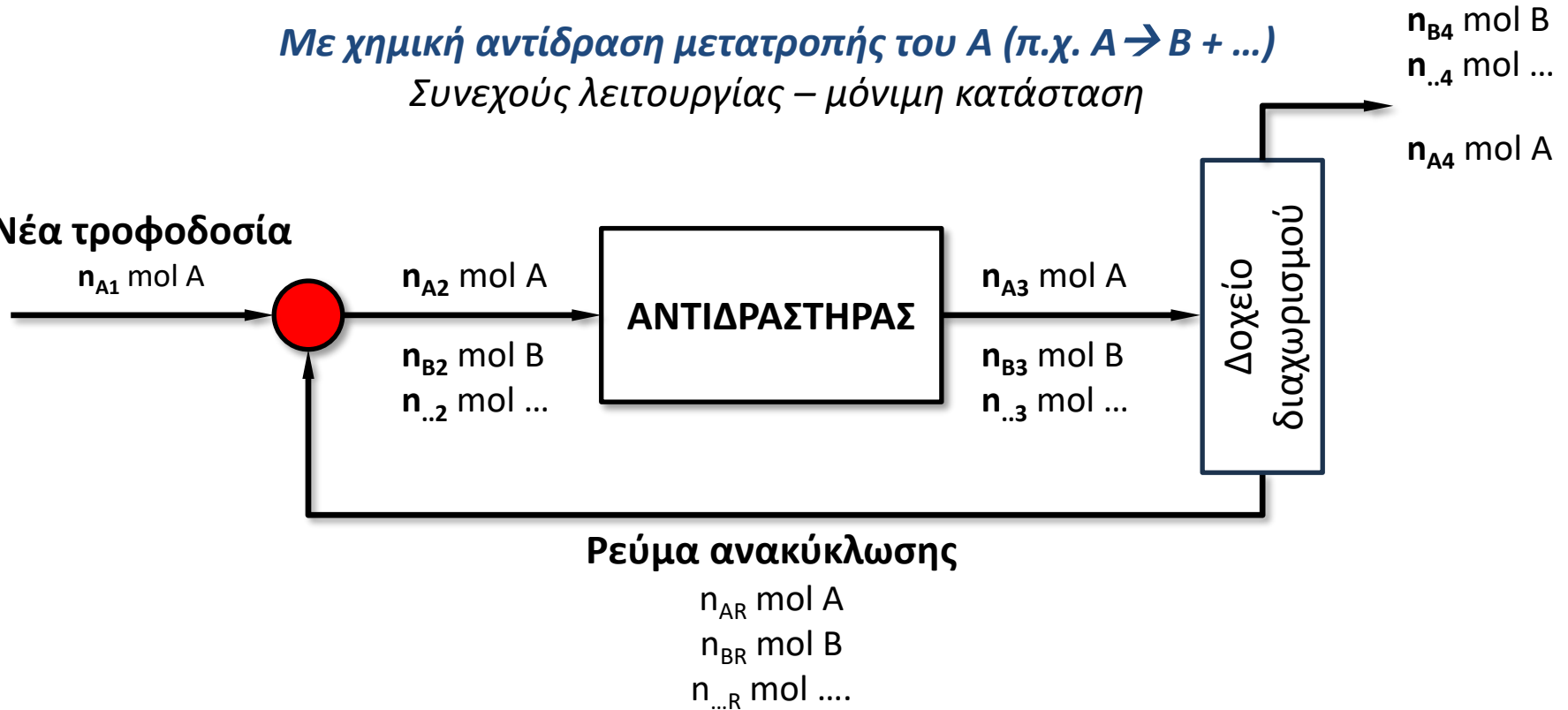
**ΠΕΡΙ ΙΣΟΖΥΓΙΩΝ ΣΕ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ
ΜΕ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗ ΚΑΙ ΑΝΑΚΥΚΛΩΣΗ**

ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΜΕ ΑΝΑΚΥΚΛΩΣΗ

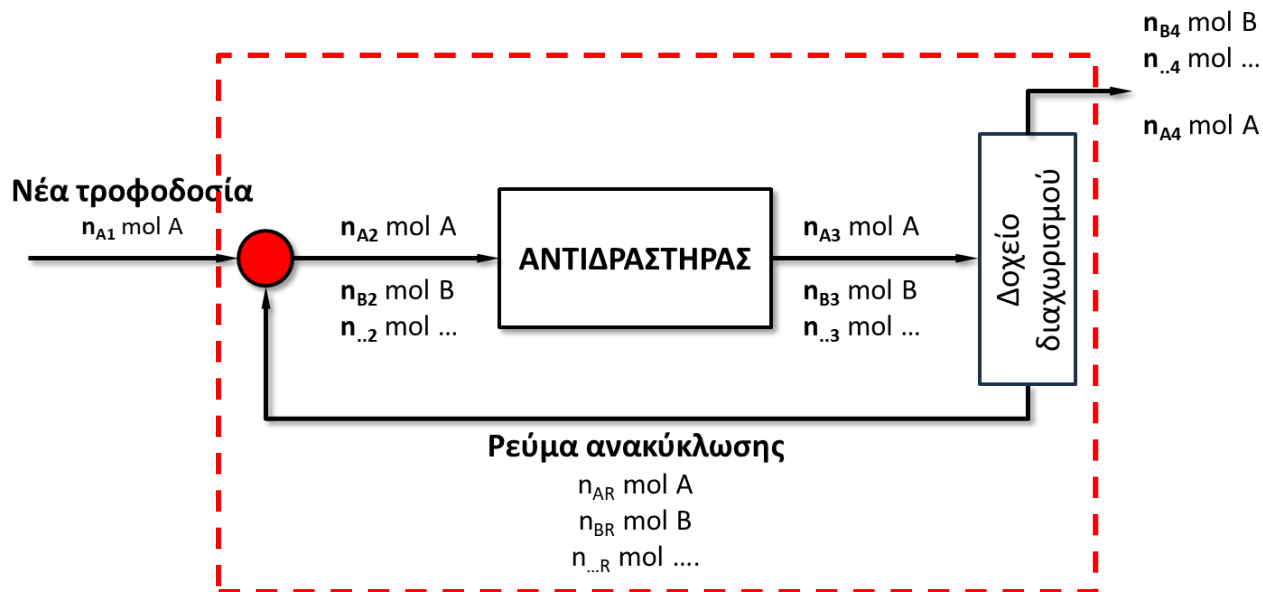
Με χημική αντίδραση μετατροπής του A (π.χ. $A \rightarrow B + \dots$)

Συνεχούς λειτουργίας – μόνιμη κατάσταση

Νέα τροφοδοσία

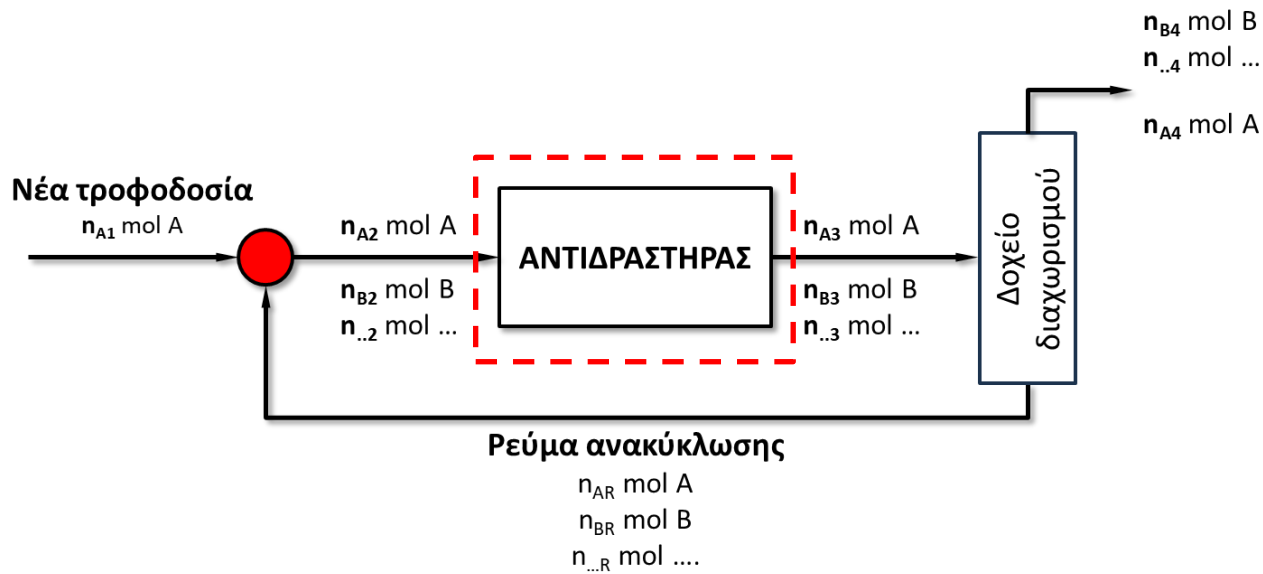


$$\text{Λόγος Ανακύκλωσης } \Sigma R = \frac{\text{Ρεύμα Ανακύκλωσης}}{\text{Νέα Τροφοδοσία}} = \frac{n_{AR}}{n_{A1}}$$



$$\text{ΣΥΝΟΛΙΚΟ ΚΛΑΣΜΑ ΜΕΤΑΤΡΟΠΗΣ } f_{OA} = \frac{\text{mol περιοριστικού αντιδρώντος που (συνολικά) αντέδρασαν}}{\text{mol περιοριστικού αντιδρώντος στη νέα τροφοδοσία}} =$$

$$\frac{\text{mol περιοριστικού αντιδρώντος στη νέα τροφοδοσία} - \text{mol περ.αντιδρ. στο προϊόν της διεργασίας}}{\text{mol περιοριστικού αντιδρώντος στη νέα τροφοδοσία}} = \frac{n_{A1} - n_{A4}}{n_{A1}}$$



ΚΛΑΣΜΑ ΜΕΤΑΤΡΟΠΗΣ ΣΕ ΕΝΑ ΠΕΡΑΣΜΑ (Single pass) [Βαθμός μετατροπής στον αντιδραστήρα]

$$f_{SP} = \frac{\text{mol περιοριστικού αντιδρώντος που αντιδρούν σε κάθε περαςμα}}{\text{mol περιοριστικού αντιδρώντος στη τροφοδοσια του αντιδραστηρα}}$$

$$\frac{\text{mol περ. αντιδρ. που εισάγεται στον αντιδραστήρα} - \text{mol περ. αντιδρ. στην έξοδο του αντιδραστήρα}}{\text{mol περ. αντιδρ. που εισάγεται στον αντιδραστήρα}} = \frac{n_{A2} - n_{A3}}{n_{A2}}$$