

ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ

ΛΥΜΕΝΕΣ ΑΣΚΗΣΕΙΣ ΓΙΑ ΘΕΜΑΤΙΚΗ ΕΝΟΤΗΤΑ:

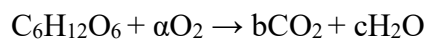
**«Η χημική αντίδραση και η στοιχειομετρία.
Ισοζύγια μάζας διεργασιών που περιλαμβάνουν
χημική αντίδραση με έμφαση στην καύση, περίσσεια.
Ισοζύγια μάζας που περιλαμβάνουν πολλαπλές
μονάδες εξοπλισμού»**

**Διδάσκοντες:
Γκαϊντατζής Γεώργιος
Δούναβης Αθανάσιος**

Ξάνθη, Εαρινό Εξάμηνο 2025

Παράδειγμα 5.1 Συμπλήρωση Εξίσωσης Βιολογικών Αντιδράσεων

Η κυριότερη πηγή ενέργειας για τα κύτταρα είναι ο αερόβιος καταβολισμός (οξείδωση) της γλυκόζης ($C_6H_{12}O_6$, σάκχαρο). Η συνολική οξείδωση της γλυκόζης οδηγεί στον σχηματισμό CO_2 και H_2O σύμφωνα με την αντίδραση



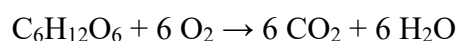
Λύση

Βάση: Η συγκεκριμένη εξίσωση χημικής αντίδραση

Το ισοζύγιο του άνθρακα δίνει $b = 6$, το ισοζύγιο του υδρογόνου δίνει $c = 6$ και το ισοζύγιο του οξυγόνου δίνει την παρακάτω αντίδραση:

$$6 + 2a = 6 \times 2 + 6$$

η οποία δίνει $a = 6$. Επομένως η συμπληρωμένη αντίδραση έχει ως εξής:

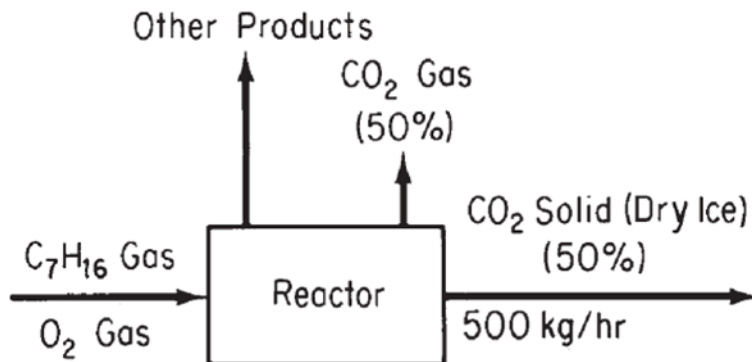


Ο έλεγχος συνέπειας επαληθεύει πως για κάθε στοιχείο ο αριθμός των στοιχείων των αντιδρώντων είναι ίσος με τον αριθμό στοιχείων των προϊόντων.

Παράδειγμα 5.2 Υπολογισμός της Μάζας των Αντιδρώντων από την Μάζα των Προϊόντων με τη χρήση της Εξίσωσης της Χημικής Αντίδρασης

Κατά την καύση του επτανίου, παράγεται CO₂. Έστω ότι θέλετε να πάρετε 500 kg ξηρού πάγου την ώρα και ότι το 50% του CO₂ μετατρέπεται σε ξηρό πάγο όπως φαίνεται στο Σχήμα E5.2. Πόσα κιλά επτανίου πρέπει να καίγονται την ώρα;

Σχήμα E5.2



Other products: άλλα προϊόντα

Reactor: αντιδραστήρας

CO₂ Gas: αέριο CO₂

CO₂ Solid: στερεό CO₂

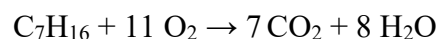
Λύση

Στην επίλυση ενός τέτοιου προβλήματος, το σημαντικό είναι η αντίστροφη αιτιολόγηση.

Πρόκειται για ένα πολύ σημαντικό και εύκολο επίτευγμα αλλά οι άνθρωποι δεν το εξασκούν συχνά.

Από την εκφώνηση του προβλήματος μπορείτε να συμπεράνετε ότι πρέπει να χρησιμοποιήσετε την μάζα του προϊόντος CO₂ για να υπολογίσετε την μάζα του αντιδρώντος C₇H₁₆. Αρχικά, θα πρέπει να μετατρέψετε τα kg του CO₂ σε moles, να εφαρμόσετε τη χημική εξίσωση για να βρείτε τα moles του C₇H₁₆, και στο τέλος να υπολογίσετε τα kg του C₇H₁₆. Θα χρησιμοποιήσουμε το Σχήμα E5.2 για την ανάλυση.

Συμβουλευτείτε το Παράρτημα B για τον προσδιορισμό των μοριακών βαρών του CO₂ (44.0) και του C₇H₁₆ (100.1). Η χημική εξίσωση είναι



Το επόμενο βήμα σας είναι η επιλογή βάσης.

Βάση: 500 kg ξηρού πάγου (αντιστοιχεί σε 1 hr)

Ο υπολογισμός της ποσότητας C_7H_{16} μπορεί να γίνει με την παρακάτω ακολουθία:

$$\frac{500 \text{ kg ξηρού πάγου}}{1 \text{ kg σχηματιζόμενου } CO_2} \left| \frac{1 \text{ kg mol } CO_2}{44.0 \text{ kg } CO_2} \right| \left| \frac{1 \text{ kg mol } C_7H_{16}}{7 \text{ kg mol } CO_2} \right|$$
$$\left| \frac{100.1 \text{ kg } C_7H_{16}}{1 \text{ kg mol } C_7H_{16}} \right| = 325 \text{ kg } C_7H_{16}$$

Επομένως η λύση αυτού του προβλήματος είναι 325 kg C_7H_{16} / ώρα. Τέλος μπορείτε να ελέγξετε αν η λύση είναι σωστή, αντιστρέφοντας την ακολουθία των υπολογισμών.

Παράδειγμα 5.3 Εφαρμογή της Στοιχειομετρίας Όταν Πραγματοποιούνται Περισσότερες από Μία Χημικές Αντιδράσεις

Από μία ανάλυση ασβεστόλιθου παίρνουμε τα εξής δεδομένα

$CaCO_3$	92.89%
$MgCO_3$	5.41%
Αδρανή	1.70%

Με θέρμανση του ασβεστόλιθου λαμβάνονται οξείδια, που αποτελούν τον ασβέστη.

- Πόσες λίβρες οξειδίου του ασβεστίου μπορούν να παραχθούν από 1 τόνο αυτού του ασβεστόλιθου;
- Πόσες λίβρες CO_2 ανακτώνται ανά λίβρα ασβεστόλιθου;
- Πόσες λίβρες ασβεστόλιθου απαιτούνται για τον σχηματισμό 1 τόνου ασβέστη;

Λύση

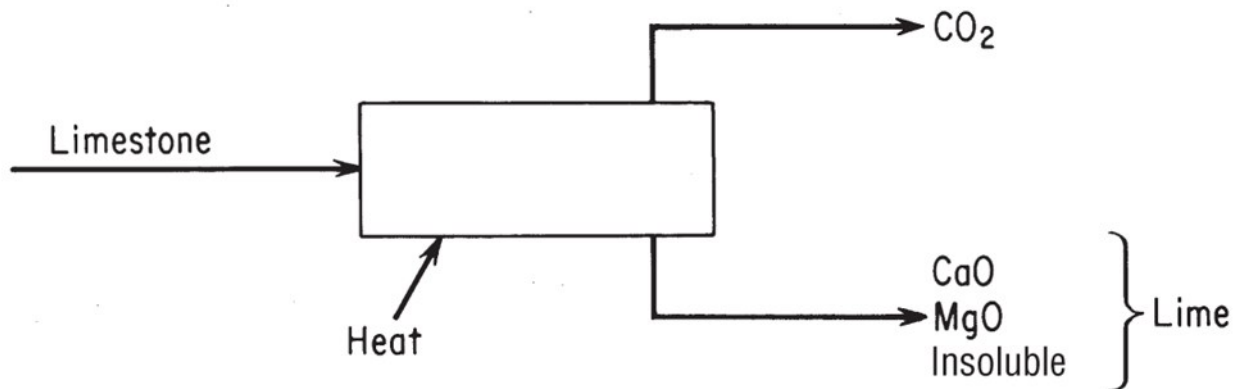
Βήματα 1 και 3

Διαβάστε το πρόβλημα προσεχτικά ώστε να καταλάβετε τι ακριβώς σας ζητείται. Τα ανθρακικά άλατα διασπώνται σε οξείδια. Θα πρέπει να γνωρίζετε ότι ο ασβέστης (οξείδια του Ca και του Mg) περιέχει όλες τις προσμείξεις που υπάρχουν στον ασβεστόλιθο που απομένει μετά την απομάκρυνση του CO_2 .

Βήμα 2

Στη συνέχεια, κάντε ένα σχήμα σχετικό με το τι συμβαίνει στην διεργασία αυτή (Σχήμα E5.3).

Σχήμα E5.3



Limestone: ασβεστόλιθος

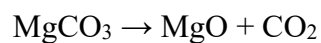
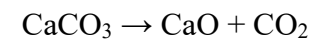
Heat: θερμότητα

Lime: ασβέστης

Insoluble: αδιάλυτο

Βήμα 4

Για να συμπληρώσετε την προκαταρκτική ανάλυση χρειάζεστε τις ακόλουθες χημικές εξισώσεις:



Άλλα δεδομένα που πρέπει να αναζητήσετε (ή να υπολογίσετε) είναι τα μοριακά βάρη των ενώσεων:

CaCO₃: 100.1, CaO: 56.08, CO₂: 44, MgCO₃: 84.32, MgO: 40.32

Βήμα 5

Το επόμενο βήμα είναι η επιλογή βάσης:

Βάση: 100 lb ασβεστόλιθου

Η βάση αυτή επιλέχτηκε γιατί οι λίβρες του κάθε συστατικού θα είναι ίσες με το ποσοστό επί τοις εκατό του βάρους τους. Θα μπορούσατε επίσης να επιλέξετε 1 lb ασβεστόλιθου ή 1 ton.

Βήματα 6 – 9

Οι υπολογισμοί της % περιεκτικότητας και των lb moles του ασβεστόλιθου και των προϊόντων με τη μορφή πίνακα αποτελούν συμπλήρωμα του Σχήματος E5.3, θα αποτελέσουν σημαντικό βοήθημα στην απάντηση των ερωτημάτων που έχουν τεθεί.

Ασβεστόλιθος			Στερεά προϊόντα		
Συστατικό	lb = ποσοστό	lb mol	Συστατικό	lb mol	lb
CaCO ₃	92.89	0.9280	CaO	0.9280	52.04
MgCO ₃	5.41	0.0642	MgO	0.0642	2.59
Αδρανή	1.70		Αδρανή		1.70
Σύνολο	100.00	0.9920	Σύνολο	0.9920	56.33

Οι ποσότητες που καταγράφονται στην στήλη Στερεά Προϊόντα υπολογίζονται από τις χημικές εξισώσεις. Για παράδειγμα:

$$\frac{92.85 \text{ lb CaCO}_3}{100.1 \text{ lb CaCO}_3} \left| \frac{1 \text{ lb mol CaCO}_3}{1 \text{ lb mol CaCO}_3} \right| \frac{1 \text{ lb mol CaO}}{1 \text{ lb mol CaCO}_3} \left| \frac{56.08 \text{ lb CaO}}{1 \text{ lb mol CaO}} \right| = 52.04 \text{ lb CaO}$$

$$\frac{5.41 \text{ lb MgCO}_3}{84.32 \text{ lb MgCO}_3} \left| \frac{1 \text{ lb mol MgCO}_3}{1 \text{ lb mol MgCO}_3} \right| \frac{1 \text{ lb mol MgO}}{1 \text{ lb mol MgCO}_3} \left| \frac{40.32 \text{ lb MgO}}{1 \text{ lb mol MgO}} \right| = 2.59 \text{ lb MgO}$$

Το CO₂ που παράγεται είναι:

0.9280 lb mol CaO είναι ισοδύναμο με 0.9280 lb mol CO₂
 0.0642 lb mol MgO είναι ισοδύναμο με 0.0642 lb mol CO₂
 Σύνολο 0.9920 lb mol CO₂

$$\frac{0.9920 \text{ lb mol CO}_2}{1 \text{ lb mol CO}_2} \left| \frac{44.0 \text{ lb CO}_2}{1 \text{ lb mol CO}_2} \right| = 44.67 \text{ lb CO}_2$$

Εναλλακτικά, θα μπορούσατε να υπολογίσετε τις lb του CO₂ από το ολικό ισοζύγιο: 100 – 56.33 = 44.67. Σημειώστε ότι οι ολικές λίβρες όλων των προϊόντων ισοδυναμούν με 100 lb εισαγόμενου ασβεστόλιθου. Αν δεν ήταν ίσες, τι θα μπορούσατε να κάνετε; Ελέγξτε τις τιμές των μοριακών βαρών και τους υπολογισμούς σας.

Τώρα, για να υπολογίσετε τις ποσότητες που ζητήθηκαν αρχικά:

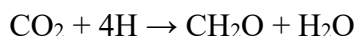
$$\text{(α) παραγόμενο CaO} = \frac{52.04 \text{ lb mol CO}_2}{100 \text{ lb ασβεστόλιθου}} \left| \frac{2000 \text{ lb}}{1 \text{ ton}} \right| = 1041 \text{ lb CaO/ton (ασβεστόλιθος)}$$

$$\text{(β) ανακτόμενο CO}_2 = \frac{43.67 \text{ lb CO}_2}{100 \text{ lb ασβεστόλιθου}} = 0.437 \text{ lb CO}_2 / \text{lb (ασβετόλιθος)}$$

$$\text{(γ) ασβεστόλιθος που απαιτείται} = \frac{100 \text{ lb ασβεστόλιθου}}{56.33 \text{ lb lime}} \left| \frac{2000 \text{ lb}}{1 \text{ ton}} \right| = 3550 \text{ lb (ασβετόλιθος)/ton lime}$$

Παράδειγμα 5.4: Υπολογισμός της Έκτασης της Αντίδρασης

Το NADH (νικοτιναμιδο-αδενοδινοκυκλοσιδίο) προμηθεύει με υδρογόνο τα ζωντανά κύτταρα για αντιδράσεις βιοσύνθεσης όπως η παρακάτω:

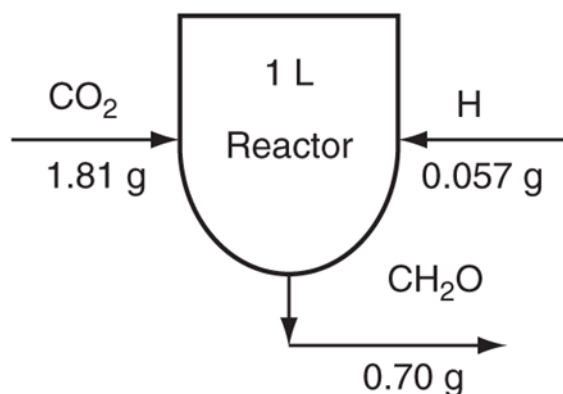


Αν 1 L απαερωμένου νερού κορεστεί με αέριο CO_2 στους 20°C (η διαλυτότητα είναι $1,81 \text{ g CO}_2/\text{L}$) και προστεθεί αρκετό NADH και τροφοδοτηθούν $0,057 \text{ gr H}$ σε έναν βιοαντιδραστήρα που χρησιμοποιείται για να μιμηθεί τις αντιδράσεις στα κύτταρα, με αποτέλεσμα να ληφθούν $0,7 \text{ g CH}_2\text{O}$, ποια είναι η έκταση της αντίδρασης για την αντίδραση αυτή; Χρησιμοποιήστε την έκταση της αντίδρασης για να καθορίσετε τον αριθμό των γραμμαρίων CO_2 που απομένουν στο διάλυμα.

Λύση

Βάση: 1L νερό κορεσμένο με CO_2

Σχήμα E5.4



Reactor: Αντιδραστήρας

Η έκταση της αντίδρασης μπορεί να υπολογιστεί με την εφαρμογή της Εξίσωσης (5.3) που βασίζεται στην τιμή του CH_2O :

$$n_{\text{CH}_2\text{O}}^{\text{τελικό}} = \frac{0.70 \text{ g CH}_2\text{O}}{1} \left| \frac{1 \text{ g mol CH}_2\text{O}}{30.02 \text{ g CH}_2\text{O}} \right. = 0.0233 \text{ g mol CH}_2\text{O}$$

$$n_{\text{CH}_2\text{O}}^{\text{αρχικό}} = \frac{0 \text{ g CH}_2\text{O}}{1} \left| \frac{1 \text{ g mol CH}_2\text{O}}{30.02 \text{ g CH}_2\text{O}} \right. = 0 \text{ g mol CH}_2\text{O}$$

$$\xi = \frac{n_i - n_{i0}}{\nu_i} = \frac{(0.0233 - 0) \text{ g mol CH}_2\text{O}}{1 \text{ g mol CH}_2\text{O}/\text{mole που αντιδρούν}} = 0.0233 \text{ mole που αντιδρούν}$$

Ο αριθμός των moles του CO₂ που απομένει στο διάλυμα μπορεί να βρεθεί χρησιμοποιώντας την Εξίσωση (5.4) ή την Εξίσωση (5.3) για το CO₂:

$$n_{\text{CO}_2 \text{ αρχικό}} = \frac{1.81 \text{ g CO}_2}{44 \text{ g CO}_2} \left| \frac{1 \text{ g mol CO}_2}{1 \text{ g mol CO}_2} \right. = 0.041 \text{ g mol CO}_2$$

$$n_{\text{CO}_2 \text{ τελικό}} = 0.041 + (-1)(0.0233) = 0.0177 \text{ g mol CO}_2$$

$$m_{\text{CO}_2 \text{ τελικό}} = \frac{0.0177 \text{ g mol CO}_2}{1 \text{ g mol CO}_2} \left| \frac{44 \text{ g CO}_2}{1 \text{ g mol CO}_2} \right. = 0.78 \text{ g CO}_2$$

Συνοψίζοντας, το σημαντικό χαρακτηριστικό της μεταβλητής ξ είναι ότι έχει την ίδια τιμή για όλα τα μοριακά χημικά είδη που συμμετέχουν σε μία συγκεκριμένη χημική αντίδραση. Έτσι, με δεδομένους τους αριθμούς των αρχικών moles όλων των χημικών ειδών και την τιμή της έκτασης ξ (ή με δεδομένη την μεταβολή του αριθμού των moles ενός χημικού είδους από την οποία μπορεί να υπολογιστεί η τιμή του ξ όπως έγινε στο Παράδειγμα 5.4) εύκολα μπορείτε να υπολογίσετε τις ποσότητες όλων των moles στο σύστημα χρησιμοποιώντας την Εξίσωση (5.4).

Παράδειγμα 5.5 Υπολογισμός του Περιοριστικού Αντιδρώντος και του Αντιδρώντος σε Περίσσεια από τη Μάζα των Αντιδρώντων

Στο παράδειγμα αυτό θα χρησιμοποιήσουμε τα ίδια δεδομένα με το Παράδειγμα 5.4. Η βάση και το σχήμα είναι τα ίδια.

- Ποιος είναι η μέγιστη ποσότητα σε g του CH₂O που μπορεί να παραχθεί;
- Ποιο είναι το περιοριστικό αντιδρών;
- Ποιο είναι το αντιδρών σε περίσσεια;

Λύση

Το πρώτο βήμα είναι ο καθορισμός του περιοριστικού αντιδρώντος, υπολογίζοντας τη μέγιστη έκταση της αντίδρασης με βάση την πλήρη αντίδραση του CO₂ με το H.

$$\xi^{\max}(\text{με βάση CO}_2) = \frac{0 - 0.041 \text{ g mol CO}_2}{-1 \text{ g mol CO}_2/\text{αντιδρώντα mole}} = 0.041 \text{ Αντιδρώντα mole}$$

$$\xi^{\max}(\text{με βάση H}) = \frac{0 - 0.057 \text{ g mol H}}{-4 \text{ g mol H}/\text{αντιδρώντα mole}} = 0.014 \text{ Αντιδρώντα mole}$$

Μπορείτε να συμπεράνετε ότι (β) το H είναι το περιοριστικό αντιδρών και (γ) το CO₂ είναι το αντιδρών σε περίσσεια. Η επιπλέον ποσότητα του CO₂ είναι (0.041 – 0.014) = 0,027 g mol. Για να απαντήσουμε στην ερώτηση α, το μέγιστο ποσό του CH₂O σε g

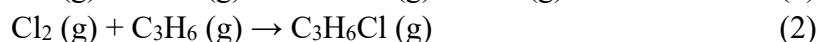
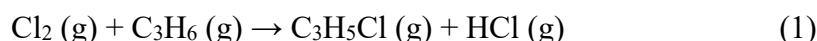
που μπορεί να παραχθεί βασίζεται στην υποθετική πλήρη μετατροπή του περιοριστικού αντιδρώντος:

$$\frac{0.014 \text{ g mol H}}{4 \text{ g mol H}} \left| \frac{1 \text{ g mol CH}_2\text{O}}{1 \text{ g mol CH}_2\text{O}} \right| \frac{30.02 \text{ g CH}_2\text{O}}{1 \text{ g mol CH}_2\text{O}} = 0.017 \text{ g CH}_2\text{O}$$

Τέλος, πρέπει να επαληθεύσετε την απάντησή σας ξεκινώντας από την απάντηση για το δεδομένο αντιδρών ή εναλλακτικά αθροίζοντας τη μάζα του C με τη μάζα του περίσσιου H. Με τι θα πρέπει να ισούται αυτό το άθροισμα;

Παράδειγμα 5.6 Υπολογισμός Διάφορων Όρων που Αναφέρονται σε Εξισώσεις

Ο Semenov [N.N. Semenov, *Some Problems in Chemical Kinetics and Reactivity*, Τόμος II, Princeton University Press, Princeton (1959), σελ. 39-42] περιέγραψε την χημεία των αλλυλοχλωριδίων. Δύο ενδιαφέρουσες αντιδράσεις στην περίπτωση των ενώσεων αυτών είναι:



Το C_3H_6 είναι το προπυλένιο (προπένιο) (MB = 42.08)

Το $\text{C}_3\text{H}_5\text{Cl}$ είναι το αλλυλοχλωρίδιο (3-χλωροπροπένιο) (MB = 112.99)

Το $\text{C}_3\text{H}_6\text{Cl}_2$ είναι το προπυλενο-χλωρίδιο (1,2-διχλωροπροπάνιο) (MB = 112.99).

Οι ενώσεις που λαμβάνονται μετά το τέλος των αντιδράσεων καταγράφονται στον Πίνακα E5.6.

Πίνακας E5.6

Είδος	g mol
Cl_2	141.0
C_3H_6	651.0
$\text{C}_3\text{H}_5\text{Cl}$	4.6
$\text{C}_3\text{H}_6\text{Cl}_2$	24.5
HCl	4.6

Με βάση την κατανομή των προϊόντων στον Πίνακα E5.6 και θεωρώντας πως η τροφοδοσία αποτελείται αποκλειστικά από Cl_2 και C_3H_6 υπολογίστε τα ακόλουθα:

- Πόσο Cl_2 και C_3H_6 εισήχθησαν στην τροφοδοσία σε g mol;
- Ποιο ήταν το περιοριστικό αντιδρών;
- Ποιο ήταν το αντιδρών σε περίσσεια;
- Ποιο ήταν το κλάσμα μετατροπής του C_3H_6 σε $\text{C}_3\text{H}_5\text{Cl}$;

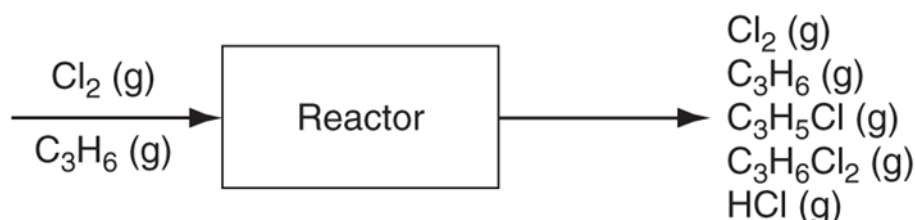
- ε. Ποια ήταν η εκλεκτικότητα του C_3H_5Cl σε σχέση με το $C_3H_6Cl_2$;
 στ. Ποια ήταν η απόδοση του C_3H_5Cl εκφρασμένη σε g C_3H_5Cl προς τα g C_3H_6 που εισήχθησαν στην τροφοδοσία;
 ζ. Ποια ήταν έκταση των αντιδράσεων (1) και (2);

Λύση

Βήματα 1 – 4

Από την εκφώνηση του προβλήματος παρατηρούμε ότι το ποσό της τροφοδοσίας δεν δίνεται, και συνεπώς πρώτα θα πρέπει να υπολογίσετε τα g mol που εισήχθησαν στον αντιδραστήρα ακόμη και αν τα ποσά αυτά δεν ζητούνται. Τα μοριακά βάρη είναι γνωστά. Το Σχήμα E5.6 απεικονίζει την διεργασία σαν ανοιχτό σύστημα ροής.

Σχήμα E5.6



Reactor: αντιδραστήρας

Βήμα 5

Μία βολική βάση προκύπτει από τα δεδομένα του Πίνακα E9.8

Βήματα 7 – 9

Χρησιμοποιείστε τις χημικές εξισώσεις για τον υπολογισμό των moles των ειδών της τροφοδοσίας. Ξεκινήστε με το Cl_2

Αντίδραση (1):

$$\frac{4.6 \text{ g mol}}{1 \text{ g mol } C_3H_5Cl} \left| \frac{1 \text{ g mol } Cl_2}{1 \text{ g mol } C_3H_5Cl} \right. = 4.6 \text{ g mol } Cl_2 \text{ αντιδρά}$$

Αντίδραση (2)

$$\frac{24.5 \text{ g mol } C_3H_6Cl_2}{1 \text{ g mol } C_3H_6Cl_2} \left| \frac{1 \text{ g mol } Cl_2}{1 \text{ g mol } C_3H_6Cl_2} \right. = 24.5 \text{ g mol αντιδρούν}$$

Σύνολο	29.1 g mol Cl ₂ που αντιδρούν
Cl ₂ που δεν αντέδρασε στο προϊόν	<u>141.0</u>
α. Συνολικό Cl ₂ στην τροφοδοσία	170.1

Τι γίνεται όμως με την ποσότητα του C₃H₆ στην τροφοδοσία; Από τις χημικές εξισώσεις, καταλαβαίνετε ότι αν αντιδρούν συνολικά 29.1 g mol Cl₂ σύμφωνα με τις Αντιδράσεις (1) και (2), θα πρέπει να αντιδράσουν 29.1 g mol C₃H₆. Επειδή υπάρχουν στο προϊόν 651.0 g mol του C₃H₆ που δεν έχουν αντιδράσει, εισήχθησαν στον αντιδραστήρα 651.0 + 29.1 = 680.1 g mol C₃H₆.

Μπορείτε να ελέγξετε τις απαντήσεις αυτές, προσθέτοντας τα g mol του Cl, C, και H στο προϊόν και συγκρίνοντας τις τιμές αυτές με αυτές που υπολογίστηκαν στην τροφοδοσία:

Στα προϊόντα

$$\text{Cl} \quad 2(141.0) + 1(4.6) + 2(24.5) + 1(4.6) = 340.2$$

$$\text{C} \quad 3(651) + 3(4.6) + 3(24.5) = 2040.3$$

$$\text{H} \quad 6(651) + 5(4.6) + 6(24.5) + 1(4.6) = 4080.6$$

Στην τροφοδοσία

$$\text{Cl} \quad 2(170.1) = 340.2 \quad \text{OK}$$

$$\text{C} \quad 3(680.1) = 2040.3 \quad \text{OK}$$

$$\text{H} \quad 6(680.1) = 4080.6 \quad \text{OK}$$

Δεν θα προχωρήσουμε λεπτομερώς στους υπολογισμούς που απομένουν, αλλά θα προσδιορίσουμε απλά τις επιθυμητές ποσότητες με βάση τα δεδομένα που υπάρχουν για τα μέρη α, β και γ. Στο συγκεκριμένο πρόβλημα, αφού και οι δύο αντιδράσεις περιλαμβάνουν τους ίδιους στοιχειομετρικούς συντελεστές αντίδρασης, και οι δύο αντιδράσεις θα έχουν τα ίδια περιοριστικά αντιδρώντα και τα ίδια αντιδρώντα σε περίσσεια.

$$\xi^{\max}(\text{με βάση C}_3\text{H}_6) = \frac{-680.1 \text{ g mol C}_3\text{H}_6}{-1 \text{ g mol C}_3\text{H}_6/\text{αντιδρώντα mole}} = 680.1 \text{ Αντιδρώντα mole}$$

$$\xi^{\max}(\text{με βάση Cl}_2) = \frac{-170.1 \text{ g mol Cl}_2}{-1 \text{ g mol Cl}_2/\text{αντιδρώντα mole}} = 170.1 \text{ Αντιδρώντα mole}$$

Επομένως το C₃H₆ ήταν το αντιδρών σε περίσσεια και το Cl₂ το περιοριστικό.

δ. Το κλάσμα μετατροπής του C₃H₆ σε C₃H₅Cl ήταν:

$$\frac{29.1 \text{ g mol C}_3\text{H}_6 \text{ που αντέδρασε}}{680.1 \text{ g mol C}_3\text{H}_6 \text{ που τροφοδοτήθηκαν}} = 0.043$$

ε. Η εκλεκτικότητα ήταν

$$\frac{4.6 \text{ g mol C}_3\text{H}_5\text{Cl}}{24.5 \text{ g mol C}_3\text{H}_6\text{Cl}_2} = 0.19 \frac{\text{mol C}_3\text{H}_5\text{Cl}}{\text{g mol C}_3\text{H}_6\text{Cl}_2}$$

στ. Η απόδοση ήταν

$$\frac{(76.53)(4.6) \text{ g C}_3\text{H}_5\text{Cl}}{(42.08)(680.1) \text{ g C}_3\text{H}_6} = 0.012 \frac{\text{g C}_3\text{H}_5\text{Cl}}{\text{g C}_3\text{H}_6}$$

ζ. Επειδή το C₃H₅Cl παράγεται μόνο από την πρώτη αντίδραση, η έκταση της πρώτης αντίδρασης είναι

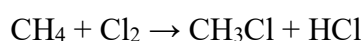
$$\xi_1 = \frac{n_i - n_{i0}}{\nu_i} = \frac{4.6 - 0}{1} = 4.6$$

Επειδή το C₃H₆Cl₂ παράγεται μόνο από την δεύτερη αντίδραση, η έκταση της δεύτερης αντίδρασης είναι

$$\xi_2 = \frac{n_i - n_{i0}}{\nu_i} = \frac{24.5 - 0}{1} = 24.5$$

Παράδειγμα 5.7. Χημική Αντίδραση στην Οποία Καθορίζεται το Κλάσμα Μετατροπής

Η χλωρίωση του μεθανίου γίνεται σύμφωνα με την παρακάτω αντίδραση:



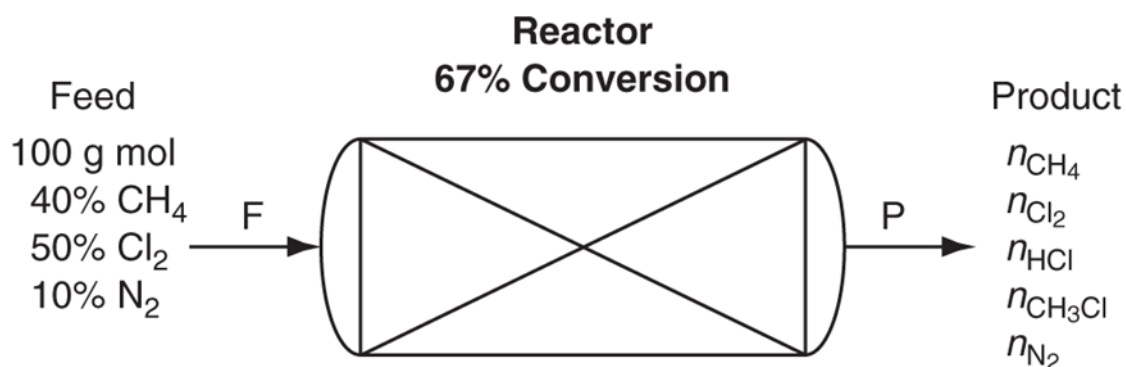
Σας ζητείται να προσδιορίσετε τη σύσταση του προϊόντος αν η μετατροπή του περιοριστικού αντιδρώντος είναι 67%, ενώ η σύσταση της τροφοδοσίας σε ποσοστό mole είναι 40% CH₄, 50% Cl₂ και 10% N₂.

Λύση

Βήματα 1 – 4

Θεωρήστε τον αντιδραστήρα σαν ανοιχτή διεργασία σταθερής κατάστασης. Στο Σχήμα E5.7 απεικονίζεται η διεργασία μαζί τις απαραίτητες πληροφορίες.

Σχήμα Ε5.7.



Reactor: αντιδραστήρας

Feed: τροφοδοσία

Conversion: μετατροπή

Product: προϊόν

Βήμα 5

Επιλέξτε μια βάση:

Βάση: 100 g mol τροφοδοσίας.

Βήμα 4

Πρέπει να υπολογίσετε το περιοριστικό αντιδρών, αν χρησιμοποιήσετε την πληροφορία για την μετατροπή κατά 67%. Με σύγκριση της μέγιστης έκτασης της χημικής αντίδρασης για κάθε αντιδρών, μπορείτε να προσδιορίσετε το περιοριστικό αντιδρών ως το είδος με το μικρότερο $\xi^{\text{μέγιστο}}$, όπως εξηγήσαμε στην Ενότητα 5.1.

$$\xi^{\text{μέγιστο}}(\text{CH}_4) = \frac{n_{i0}}{\nu_i} = \frac{40}{-(-1)} = 40$$

$$\xi^{\text{μέγιστο}}(\text{Cl}_2) = \frac{n_{i0}}{\nu_i} = \frac{50}{-(-1)} = 50$$

Επομένως, το CH₄ είναι το περιοριστικό αντιδρών. Τώρα, μπορείτε να υπολογίσετε την έκταση της αντίδρασης χρησιμοποιώντας τον καθορισμένο ρυθμό μετατροπής και την Εξίσωση (5.10).

$$\xi = \frac{(-f)n_{\text{περιοριστικό αντιδρών}}^{\text{είσοδος}}}{\nu_{\text{περιοριστικό αντιδρών}}} = \frac{(-0.67)(40)}{-1} = 26.8 \text{ αντιδρώντα mole}$$

Βήματα 6 και 7

Το επόμενο βήμα είναι η της ανάλυσης των βαθμών ελευθερίας

Αριθμός μεταβλητών: 11

$$n_{\text{CH}_4}^{\text{είσοδος}}, n_{\text{Cl}_2}^{\text{είσοδος}}, n_{\text{N}_2}^{\text{είσοδος}}, n_{\text{CH}_4}^{\text{έξοδος}}, n_{\text{Cl}_2}^{\text{έξοδος}}, n_{\text{HCl}}, n_{\text{CH}_3\text{Cl}}, n_{\text{N}_2}^{\text{έξοδος}}, F, P, \xi$$

αλλά μπορείτε να ορίσετε τιμές για τις τρεις πρώτες μεταβλητές συν το F, και να έχετε υπολογίσει το ξ , έτσι ο αριθμός των αγνώστων περιορίζεται στους 6.

Αριθμός ανεξάρτητων εξισώσεων: 6

Ισοζύγια μαζών ειδών: 5 $\text{CH}_4, \text{Cl}_2, \text{HCl}, \text{CH}_3\text{Cl}, \text{N}_2$

Προδιαγραφές 0 (το f χρησιμοποιήθηκε για να υπολογιστεί το ξ στο βήμα 4)

Συνεπαγόμενες εξισώσεις: 1 (γιατί 1 αντί για 2;)

$$\sum n_i^{\text{έξοδος}} = P \quad (\text{το άθροισμα } \sum n_i^{\text{είσοδος}} = F \text{ είναι περιττό})$$

Οι βαθμοί ελευθερίας είναι μηδέν.

Βήματα 8 και 9

Τα ισοζύγια μάζας των ειδών (σε moles), με βάση την Εξίσωση (5.8) δίνουν μία άμεση λύση για κάθε είδος προϊόντος:

$$n_{\text{CH}_4}^{\text{έξοδος}} = 40 - 1 (26.8) = 13.2$$

$$n_{\text{Cl}_2}^{\text{έξοδος}} = 50 - 1 (26.8) = 23.2$$

$$n_{\text{CH}_3\text{Cl}}^{\text{έξοδος}} = 0 + 1 (26.8) = 26.8$$

$$n_{\text{HCl}}^{\text{έξοδος}} = 0 + 1 (26.8) = 26.8$$

$$n_{\text{N}_2}^{\text{έξοδος}} = 10 - 0 (26.8) = 10.0$$

$$P = 100.0$$

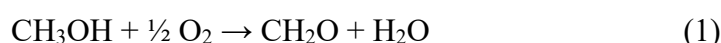
Επομένως, η σύνθεση του ρεύματος προϊόντος είναι: 13.2% CH₄, 23.2% Cl₂, 26.8% HCl, 26.8% CH₃Cl, και 10.0% N₂ επειδή ο συνολικός αριθμός των moles των προϊόντων είναι 100 g mol. Υπάρχουν 100 g mol προϊόντων επειδή υπάρχουν 100 g mol τροφοδοσίας, και στην εξίσωση της χημικής αντίδρασης έχουμε τον ίδιο αριθμό moles για τα αντιδρώντα και τα προϊόντα. Τι θα έπρεπε να κάνετε αν τα συνολικά moles στο P δεν ήταν 100 g mol; Θυμηθείτε τις καμήλες!

Βήμα 10

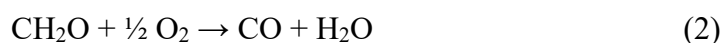
Το γεγονός ότι ικανοποιείται το περιττό συνολικό ισοζύγιο moles της εξίσωσης, αποτελεί αξιόπιστο κριτήριο ελέγχου για το πρόβλημα

Παράδειγμα 5.8 Ισοζύγια Μάζας που Περιλαμβάνουν Ταυτόχρονα Δύο Χημικές Αντιδράσεις

Η φορμαλδεΰδη (CH₂O) παράγεται βιομηχανικά με καταλυτική οξείδωση της μεθανόλης (CH₃OH) σύμφωνα με την παρακάτω αντίδραση:



Δυστυχώς, στις συνθήκες στις οποίες η παραγωγή της φορμαλδεΰδης γίνεται με υψηλό ρυθμό, ένα σημαντικό ποσοστό της φορμαλδεΰδης αντιδρά με το οξυγόνο και δίνει CO και H₂O:



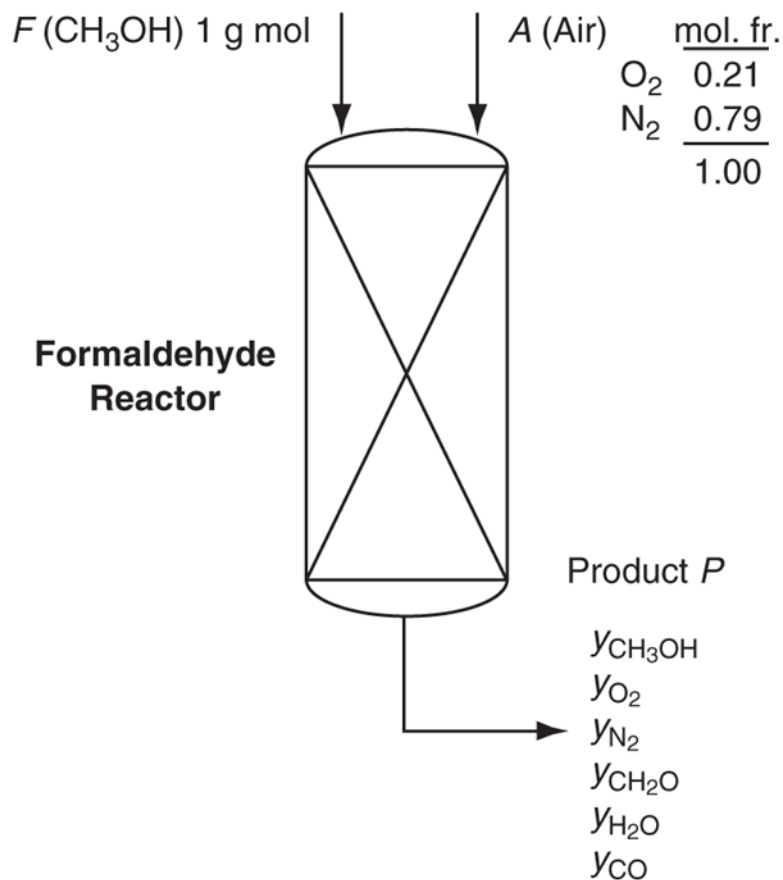
Έστω ότι, στον αντιδραστήρα τροφοδοτείται μεθανόλη και ποσότητα αέρα διπλάσια από την στοιχειομετρική που απαιτείται για την πλήρη οξείδωση της CH₃OH, ότι η μεθανόλη μετατρέπεται κατά 90% και ότι με βάση την θεωρητική παραγωγή της CH₂O, η απόδοση σε φορμαλδεΰδη είναι ίση με 75% (σύμφωνα με την εξίσωση (1)). Προσδιορίστε την σύσταση του αέριου προϊόντος που απομακρύνεται από τον αντιδραστήρα.

Λύση

Βήματα 1 – 4

Το Σχήμα E5.8 απεικονίζει την διεργασία, με y_i να είναι το γραμμομοριακό κλάσμα των αντίστοιχων συστατικών στο P (αέριο).

Σχήμα E5.8



Formaldehyde reactor: αντιδραστήρας φορμαλδεϋδης

Product: προϊόν

Air: αέρας

Mol. Fr.: γραμμομοριακό κλάσμα

Βήμα 5

Βάση: 1 g mol F

Βήμα 6

Στο βήμα αυτό η ιδέα είναι να ορίσετε τις τιμές των μεταβλητών που καθορίζονται άμεσα ή έμμεσα (χρησιμοποιώντας τις σχετικές προδιαγραφές). Οι παρακάτω μεταβλητές δε θα συνοδεύονται όλες από τις μονάδες τους (για γίνει έτσι το πρόβλημα λιγότερο περίπλοκο), όμως οι μονάδες που λείπουν προκύπτουν πολύ εύκολα. Ο πρώτος υπολογισμός που μπορείτε να κάνετε σ' αυτό το πρόβλημα είναι να χρησιμοποιήσετε την καθορισμένη μετατροπή της μεθανόλης και την απόδοση της φορμαλδεϋδης για τον καθορισμό της έκτασης των δύο αντιδράσεων. Έστω ξ_1 η έκταση της Αντίδρασης (1) και ξ_2 η έκταση της Αντίδρασης (2). Το περιοριστικό αντιδρών είναι η CH₃OH.

$$\text{Σημείωση } n_{\text{CH}_2\text{O}}^{\text{έξοδος, 1}} = n_{\text{CH}_2\text{O}}^{\text{είσοδος, 2}}$$

Με βάση την καθορισμένη μετατροπή, η έκταση της αντίδρασης για την Αντίδραση (1) είναι:

$$\xi_1 = \frac{-0.90}{-1} (1) = 0.9 \text{ g moles που αντιδρούν}$$

Η απόδοση σχετίζεται με το ξ_i ως εξής:

$$\text{Απόδοση της } \text{CH}_2\text{O} = \frac{n_{\text{CH}_2\text{O}}^{\text{έξοδος, 2}}}{F}$$

$$\text{Αντίδραση 1: } n_{\text{CH}_2\text{O}}^{\text{έξοδος, 1}} = n_{\text{CH}_2\text{O}}^{\text{είσοδος, 1}} + 1(\xi_1) = 0 + \xi_1 = \xi_1$$

$$\text{Αντίδραση 2: } n_{\text{CH}_2\text{O}}^{\text{έξοδος, 2}} = n_{\text{CH}_2\text{O}}^{\text{είσοδος, 2}} - 1(\xi_2) = n_{\text{CH}_2\text{O}}^{\text{έξοδος, 1}} - \xi_2 = \xi_1 - \xi_2$$

Η ειδική απόδοση είναι

$$\frac{n_{\text{CH}_2\text{O}}^{\text{έξοδος, 2}}}{F} = \frac{\xi_1 - \xi_2}{1} = 0.75$$

$$\xi_2 = (0.90 - 0.75) 0.15 \text{ moles που αντιδρούν}$$

Στη συνέχεια θα πρέπει να υπολογίσετε την ποσότητα του αέρα (A) που εισέρχεται στην διεργασία. Το εισερχόμενο οξυγόνο είναι διπλάσιο του απαιτούμενου οξυγόνου με βάση την Αντίδραση (1), δηλαδή

$$n_{\text{O}_2}^A = 2 \left(\frac{1}{2} F \right) = 2 \left(\frac{1}{2} \right) (1.00) = 1.00 \text{ g mol}$$

$$A = \frac{n_{\text{O}_2}^A}{0.21} = \frac{1.00}{0.21} = 4.76 \text{ g mol}$$

$$n_{\text{N}_2}^A = 4.76 - 1.00 = 3.76 \text{ g mol}$$

Βήματα 6 και 7

Η ανάλυση των βαθμών ελευθερίας μας δίνει

Αριθμός μεταβλητών: 11

$$F, A, P, y_{\text{CH}_3\text{OH}}^P, y_{\text{O}_2}^P, y_{\text{N}_2}^P, y_{\text{CH}_2\text{O}}^P, y_{\text{H}_2\text{O}}^P, y_{\text{CO}}^P, \xi_1, \xi_2$$

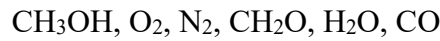
Μπορείτε να ορίσετε τις ακόλουθες τιμές σε ορισμένες από τις μεταβλητές:

Οι υπολογισμένες τιμές στο Βήμα 6 που μπορούν να αντιστοιχιστούν για τα F, A, ξ_a, ξ_b : είναι συνολικά 4

Αριθμός αγνώστων: $11 - 4 = 7$

Αριθμός ανεξάρτητων εξισώσεων που απαιτούνται: $11 - 4 = 7$, εδώ είναι 7 για να επιλέξετε:

Ισοζύγια μάζας ειδών: 6



Συνεπαγόμενη εξίσωση: 1

$$\sum y_i^P = 1$$

Βήμα 8

Επειδή οι μεταβλητές στο Σχήμα E5.8 είναι y_i^P και όχι n_i^P , η απευθείας χρήση του y_i^P στα ισοζύγια μάζας θα συμπεριλάβει τους μη γραμμικούς όρους $y_i^P P$. Θα μπορούσαμε να χρησιμοποιήσουμε τη μεταβλητή n_i^P ανάλογα με τα ισοζύγια μάζας σε προηγούμενα παραδείγματα, αλλά για ενδεικτικούς σκοπούς, θα γράψουμε τις εξισώσεις σε όρους y_i^P . Στη συνέχεια θα υπολογίσουμε το P χρησιμοποιώντας την Εξίσωση (5.12).

$$\begin{aligned} P &= \sum_{i=1}^S n_i^{\text{είσοδος}} + \sum_{i=1}^S \sum_{j=1}^R v_{ij} \xi_j = 1 + 4.76 + \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^2 v_{ij} \xi_j \\ &= 5.76 + \left[(-1) + \left(-\frac{1}{2}\right) + (1) + 0 + (1) + 0 \right] 0.9 \\ &\quad + \left[0 + (-1/2) + (-1) + 0 + (1) + (1) \right] 0.15 = 6.28 \text{ g mol} \end{aligned}$$

Τα ισοζύγια μάζας των ειδών μετά την εισαγωγή των τιμών που υπολογίστηκαν και $P = 6.28$ είναι:

$$n_{\text{CH}_3\text{OH}}^{\text{έξοδος}} = y_{\text{CH}_3\text{OH}}(6.28) = 1 - (0.9) + 0 = 0.10$$

$$n_{\text{O}_2}^{\text{έξοδος}} = y_{\text{O}_2}(6.28) = 1.0 - (1/2)(0.9) - (1/2)(0.15) = 0.475$$

$$n_{\text{CH}_2\text{O}}^{\text{έξοδος}} = y_{\text{CH}_2\text{O}}(6.28) = 0 + 1(0.9) - 1(0.15) = 0.75$$

$$n_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{έξοδος}} = y_{\text{H}_2\text{O}}(6.28) = 0 + 1(0.9) + 1(0.15) = 1.05$$

$$n_{\text{CO}}^{\text{έξοδος}} = y_{\text{CO}}(6.28) = 0 + 0 + 1(0.15) = 0.15$$

$$n_{\text{N}_2}^{\text{έξοδος}} = y_{\text{N}_2}(6.28) = 3.76 - 0 - 0 = 3.76$$

Βήμα 9

Μπορείτε να επαληθεύσετε την τιμή του P με πρόσθεση όλων των $n_i^{\text{έξοδος}}$ παραπάνω

Βήμα 10

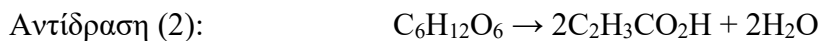
Οι έξι αντιδράσεις μπορούν να λυθούν ως προς το y_i . Βρήκατε την παρακάτω απάντηση (σε ποσοστό moles);

$$y_{\text{CH}_3\text{OH}} = 1.6\%, \quad y_{\text{O}_2} = 7.6\%, \quad y_{\text{N}_2} = 59.8\%, \quad y_{\text{CH}_2\text{O}} = 11.9\%$$

$$y_{\text{H}_2\text{O}} = 16.7\% \quad \text{και} \quad y_{\text{CO}} = 2.4\%$$

Παράδειγμα 5.9 Ανάλυση Ενός Βιοαντιδραστήρα

Ο βιοαντιδραστήρας είναι ένα δοχείο στο οποίο λαμβάνουν χώρα βιολογικές αντιδράσεις που περιλαμβάνουν ένζυμα, μικροοργανισμούς, ή/και ζωικά και φυτικά κύτταρα. Κατά την αναερόβια (απουσία οξυγόνου) ζύμωση κόκκων δημητριακών, ο ζυμομύκητας *Saccharomyces cerevisiae* διασπά τη φυτική γλυκόζη ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$) για σχηματισμό αιθανόλης ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$) και προπενοϊκού οξέος ($\text{C}_2\text{H}_3\text{OH}$) σύμφωνα με τις παρακάτω ολικές χημικές αντιδράσεις:



Σε μία διεργασία, ένα δοχείο γεμίζεται αρχικά με 4000 kg ενός διαλύματος 12% γλυκόζης σε νερό. Μετά τη ζύμωση, έχουν παραχθεί 120 kg CO_2 ενώ 90 kg γλυκόζης δεν αντιδρούν και παραμένουν στο μείγμα. Ποια είναι τα ποσοστά βάρους (μάζας) της αιθανόλης και του προπενοϊκού οξέος στο μείγμα στο τέλος της διεργασίας ζύμωσης; Υποθέστε ότι τα βακτήρια δεν αφομοιώνουν γλυκόζη.

Λύση

Θα αντιμετωπίσουμε την διεργασία αυτή σαν μία διεργασία μη μόνιμης κατάστασης σε κλειστό σύστημα. Για το συστατικό i , η Εξίσωση (5.7) γίνεται:

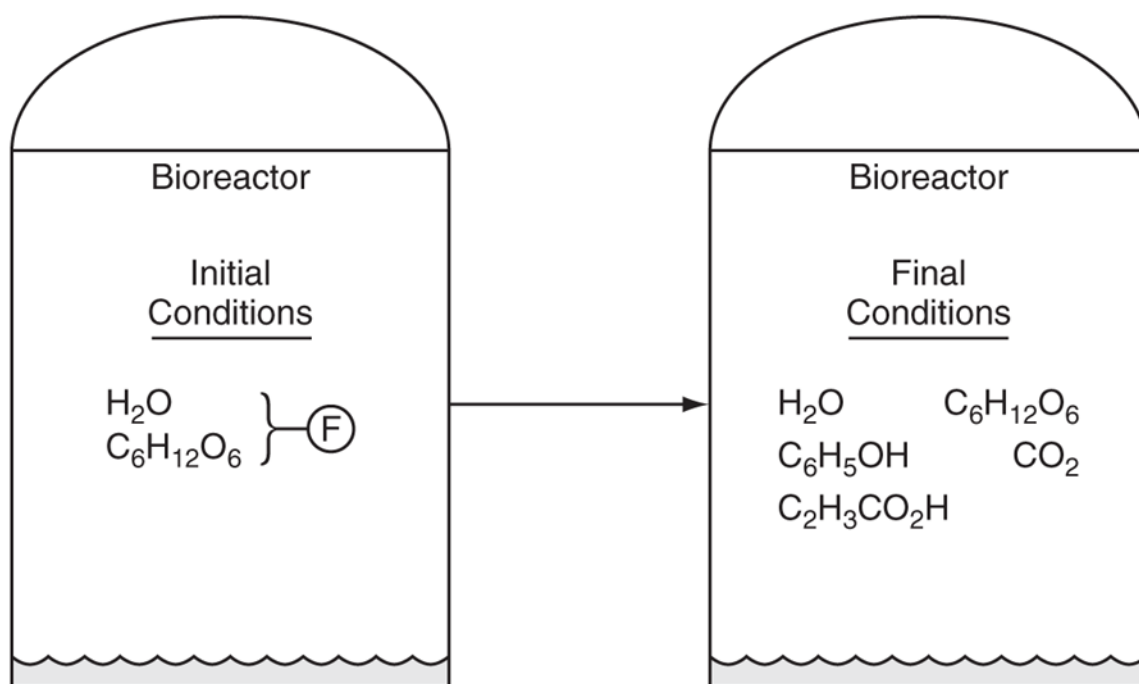
$$n_i^{\text{τελικό}} = n_i^{\text{αρχικό}} + \sum_{j=1}^R v_{ij} \xi_j \quad (5.13)$$

ανάλογη με την Εξίσωση (5.11). Οι μικροοργανισμοί δεν είναι απαραίτητο να συμπεριλαμβάνονται στην λύση του προβλήματος γιατί θεωρητικά υπάρχουν σε μικρές ποσότητες και αποτελούν καταλύτες για την αντίδραση και όχι αντιδρώντα.

Βήματα 1 – 4

Το Σχήμα E5.9 απεικονίζει την διεργασία.

Σχήμα E5.9



Bioreactor: βιοαντιδραστήρας
Initial conditions: αρχικές συνθήκες
Final conditions: τελικές συνθήκες

Βήμα 5

Βάση: 4000 kg F

Βήμα 4

Πρέπει να μετατρέψετε τα 4000 kg σε moles H₂O και C₆H₁₂O₆ γιατί η εξίσωση της αντίδρασης βασίζεται σε moles:

$$n_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{αρχικά}} = \frac{4000 (0.88)}{18.02} = 195.3 \text{ g mol}$$

$$n_{\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6}^{\text{αρχικά}} = \frac{4000 (0.12)}{180.1} = 2.665 \text{ g mol}$$

άρα F = 197.965 g mol η στρογγυλοποιημένα 198 g mol.

Βήματα 6 και 7

Η ανάλυση των βαθμών ελευθερίας είναι η εξής (σημειώστε πως οι μονάδες g mol έχουν καταργηθεί)

Αριθμός μεταβλητών: 9

$$n_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{αρχικά}}, n_{\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6}^{\text{αρχικά}}, n_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{τελικά}}, n_{\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6}^{\text{τελικά}}, n_{\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}}^{\text{τελικά}}, n_{\text{C}_2\text{H}_3\text{CO}_2\text{H}}^{\text{τελικά}}, n_{\text{CO}_2}^{\text{τελικά}}, \xi_1, \xi_2$$

Ορίστε τιμές στις αντίστοιχες μεταβλητές

Από τις προδιαγραφές μπορείτε να ορίσετε τις ακόλουθες τιμές

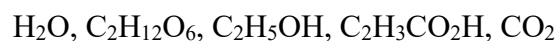
$$\left. \begin{array}{l} F = 198 \\ n_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{αρχικά}} = 195.3 \\ n_{\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6}^{\text{αρχικά}} = 2.665 \end{array} \right\} \text{μόνο 2 είναι ανεξάρτητες (Γιατί;)}$$

$$n_{\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6}^{\text{τελικά}} = \frac{90}{180.1} = 0.500$$

$$n_{\text{CO}_2}^{\text{τελικά}} = \frac{120}{44.0} = 2.727$$

Έτσι στο πρόβλημα αυτό υπάρχει ένα δίκτυο πέντε αγνώστων

Μπορείτε να δημιουργήσετε πέντε ισοζύγια ειδών:



Επομένως οι βαθμοί ελευθερίας είναι μηδέν

Βήμα 8

Οι εξισώσεις των ισοζυγίων μάζας, μετά την εισαγωγή των γνωστών τιμών των μεταβλητών, είναι:

$$\text{H}_2\text{O}: \quad n_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{τελικά}} = 195.3 + (0) \xi_1 + (2) \xi_2 \quad (1)$$

$$\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6: \quad 0.500 = 2.665 + (-1) \xi_1 + (-1) \xi_2 \quad (2)$$

$$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}: \quad n_{\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}}^{\text{τελικά}} = 0 + 2 \xi_1 + (0) \xi_2 \quad (3)$$

$$\text{C}_2\text{H}_3\text{CO}_2\text{H}: \quad n_{\text{C}_2\text{H}_3\text{CO}_2\text{H}}^{\text{τελικά}} = 0 + (0) \xi_1 + (2) \xi_2 \quad (4)$$

$$\text{CO}_2: \quad 2.727 = 0 + (2) \xi_1 + (0) \xi_2 \quad (5)$$

Βήμα 9

Υπάρχει σε κάποια από τις παραπάνω εξισώσεις ένας μοναδικός άγνωστος; Αν κάτι τέτοιο συμβαίνει, θα μπορούσατε να κάνετε τις πράξεις είτε με το μυαλό σας είτε με τη βοήθεια υπολογιστή και να μειώσετε έτσι τον αριθμό των ταυτόχρονων εξισώσεων που πρέπει να επιλυθούν. Στην πραγματικότητα η Εξίσωση (5) περιέχει μόνο το ξ_1 ως άγνωστο. Έτσι μπορείτε να προσδιορίσετε το ξ_1 χρησιμοποιώντας την εξίσωση (5). Στη συνέχεια η Εξίσωση (2) μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να υπολογίσετε την τιμή του ξ_2 . Τέλος από τις Εξισώσεις (1), (3) και (4) μπορούν να προσδιοριστούν οι υπόλοιποι άγνωστοι.

Ακολουθώντας την σειρά που περιγράφηκε πιο πάνω έχουμε:

$$\xi_1 = 1.364 \text{ kg moles που αντιδρούν} \quad \xi_2 = 0.801 \text{ kg moles που αντιδρούν}$$

Είδη	Αποτελέσματα		Μετατροπή σε ποσοστό μάζας		
	kg mol	MB	kg	Μάζα	
H ₂ O	196.9	18.01	3546.1	89.2	
C ₂ H ₅ OH	2.728	46.05	125.6	3.2	
C ₂ H ₃ CO ₂ H	1.602	72.03	115.4	2.9	
CO ₂	2.277	44.0	100.0	2.5	
C ₆ H ₁₂ O ₆	0.500	180.1	<u>90.1</u>	<u>2.3</u>	
			3977	1.00	

Βήμα 10

Η ολική μάζα των 3977 kg είναι αρκετά κοντά στα 4000 kg τροφοδοσίας για την αξιολόγηση των υπολογισμών.

Παράδειγμα 5.10 Τήξη του BaSO₄

Ο Βαρίτης (που αποτελείται εξ ολοκλήρου από BaSO₄) τήκεται (αντιδρά σε στερεή κατάσταση) σε χωνευτήριο με κωκ (αποτελούμενο κατά 94% από C και 6% από τέφρα). Η τέφρα δεν αντιδρά. Η τελική μάζα της τήξης που είναι 193.7 g που αφαιρέθηκε από τον αντιδραστήρα, αναλύθηκε και βρέθηκε να έχει την παρακάτω σύσταση:

	%
BaSO ₄	11.1
BaS	72.8
C	13.9
Ash	2.22
	<hr/> 100.0

Το αέριο που εκλύεται από το χωνευτήριο είναι άοσμο κάτι που συνεπάγεται απουσία διοξειδίου του θείου και περιέχει 1.13 mole O ανά mole C.

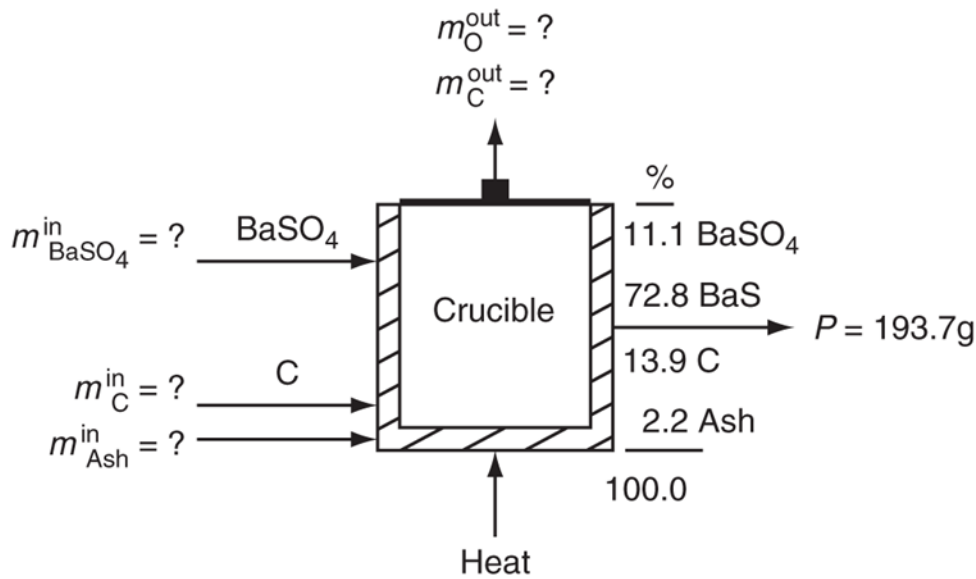
Ποια είναι η αναλογία μάζας BaSO₄ προς C (εξαιρώντας την τέφρα) στα αντιδρώντα που εισάχθηκαν στο χωνευτήριο;

Λύση

Βήματα 1- 4

Είναι μια ασυνεχής διεργασία κατά την οποία τα στερεά συστατικά εισάγονται μαζί, πραγματοποιείται η αντίδραση και στη συνέχεια η μάζα τήξης απομακρύνεται. Το Σχήμα 5.10 είναι ένα διάγραμμα της διεργασίας με εισαγμένα τα γνωστά δεδομένα. Αυτό που πρέπει να κάνετε είναι να υπολογίσετε την αναλογία μάζας $m_{\text{BaSO}_4}^{\text{είσοδος}}$ προς $m_{\text{C}}^{\text{είσοδος}}$.

Σχήμα E5.10



Crucible: χωνευτήριο

Ash: Τέφρα

Heat: Θερμότητα

Βήμα 5

Μπορείτε να πάρετε ως βάση τα 193,7 g του P, αλλά είναι ευκολότερο να πάρετε σαν βάση τα 100 g P γιατί η ανάλυση του P δίνεται σε ποσοστό κι έτσι έχετε να υπολογίσετε μόνο τα σχετικά ποσά των εισροών του C και του BaSO κι όχι τα απόλυτα ποσά.

Βήμα 4 ξανά

Κάποιοι αρχικοί υπολογισμοί της σύστασης του P θα φανούν χρήσιμοι στη λύση.

Συστατικό	g	MW	G mol	Σύσταση σε P σε g mol				
				Ba	S	O	C	Τέφρα
BaSO ₄	11.1	233.3	0.0477	0.0477	0.0477	0.19	-	-
BaS	72.8	169.3	0.431	0.430	0.430	-	-	-
C	13.9	12.0	1.16	-	-	-	1.16	-
Ash	2.2	-	-	-	-	-	-	*
	100			0.479	0.479	0.191	1.16	*
			MW:	137.34	32.064	16.0	12.0	*
			g:	65.8	15.36	3.06	13.9	2.2

Βήματα 6-8

Από το Σχήμα E5.10 μετά την ανάθεση των γνωστών τιμών στις μεταβλητές, φαίνεται πως υπάρχουν πέντε άγνωστοι, αν αγνοήσουμε τις μεταβλητές των οποίων οι τιμές είναι μηδέν (η τιμές της μάζας παρακάτω είναι σε γραμμάρια)

$$\begin{aligned}
 P &= 100 & m_O^P &= 3.06 \\
 m_{Ba}^P &= 65.8 & m_C^P &= 13.9 \\
 m_S^P &= 15.3 & m_{\text{τέφρα}}^P &= 2.2
 \end{aligned}$$

Άγνωστοι:

$$m_{BaSO_4}^{\text{είσοδος}}, m_C^{\text{είσοδος}}, m_{\text{τέφρα}}^{\text{είσοδος}}, m_C^{\text{έξοδος}}, m_O^{\text{έξοδος}}$$

Μπορείτε να φτιάξετε τα ισοζύγια των Ba, S, O, C και τέφρας, και για τον λόγο αυτό το πρόβλημα φαίνεται πως έχει μηδέν βαθμούς ελευθερίας. Η διαδικασία είναι ασυνεχής, ως εκ τούτου, εάν το χωνευτήριο είναι άδειο στην αρχή και στο τέλος της τήξης, η εξίσωση του ισοζυγίου μάζας που μπορείτε να χρησιμοποιήσετε είναι

«ότι εισέρχεται πρέπει να εξέρχεται»

Παρακάτω είναι τα στοιχειακά ισοζύγια μάζας.

Τέφρα: $m_{\text{τέφρα}}^{\text{είσοδος}} = 2.2 \text{ g}$

Είσοδος Έξοδος

$$\text{Ba: } \frac{m_{BaSO_4}^{\text{είσοδος}}}{233.3 \text{ g BaSO}_4} \left| \frac{1 \text{ g mol BaSO}_4}{1 \text{ g mol BaSO}_4} \right| \frac{1 \text{ g mol Ba}}{1 \text{ g mol BaSO}_4} \left| \frac{137.34 \text{ g Ba}}{1 \text{ g mol Ba}} \right| = 65.8 \text{ g}$$

$$m_{BaSO_4}^{\text{είσοδος}} = 111.7 \text{ g}$$

Είσοδος Έξοδος

$$\text{S: } \frac{m_{BaSO_4}^{\text{είσοδος}}}{233.3 \text{ g BaSO}_4} \left| \frac{1 \text{ g mol BaSO}_4}{1 \text{ g mol BaSO}_4} \right| \frac{1 \text{ g mol S}}{1 \text{ g mol BaSO}_4} \left| \frac{32.064 \text{ g S}}{1 \text{ g mol S}} \right| = 15.36 \text{ g}$$

$$m_{BaSO_4}^{\text{είσοδος}} = 111.7 \text{ g}$$

Είσοδος Έξοδος

$$\text{O: } \frac{m_{BaSO_4}^{\text{είσοδος}}}{233.3 \text{ g BaSO}_4} \left| \frac{1 \text{ g mol BaSO}_4}{1 \text{ g mol BaSO}_4} \right| \frac{4 \text{ g mol O}}{1 \text{ g mol BaSO}_4} \left| \frac{16.0 \text{ g O}}{1 \text{ g mol O}} \right| = m_O^{\text{έξοδος}} + 3.06 \text{ g}$$

Εισάγετε την $m_{BaSO_4}^{\text{είσοδος}} = 117 \text{ g}$ στο ισοζύγιο του O για να πάρετε $m_O^{\text{έξοδος}} = 27.56 \text{ g}$. Το μόνο ισοζύγιο που μένει είναι το ισοζύγιο του άνθρακα.

Βήμα 9

Καθώς τα ισοζύγια των Ba και S δεν είναι ανεξάρτητα, χρειαζόμαστε άλλη μια πληροφορία και συγκεκριμένα ότι $m_C^{\text{έξοδος}} = m_O^{\text{έξοδος}}/1.13 = 27.56/1.13 = 24.4$ το οποίο είναι απαραίτητο για το ισοζύγιο του άνθρακα.

$$m_C^{\text{είσοδος}} = 24.4 + 13.92 = 38.3 \text{ g}$$

$$\frac{m_{\text{BaSO}_4}^{\text{είσοδος}}}{m_C^{\text{είσοδος}}} = \frac{111.7}{38.3} = 2.92$$

Βήμα 10

Επαληθεύστε τη λύση χρησιμοποιώντας το περιττό ολικό ισοζύγιο μάζας

$$m_{\text{BaSO}_4}^{\text{είσοδος}} + m_C^{\text{είσοδος}} = m_O^{\text{έξοδος}} + m_C^{\text{έξοδος}} + P$$

$$111.7 + 38.3 \stackrel{?}{=} 27.56 + 24.4 + 100.0$$

$$150 \approx 152 \text{ αρκετά κοντά}$$

Τα στοιχειακά ισοζύγια είναι ιδιαίτερα χρήσιμα όταν δεν γνωρίζουμε ποιες αντιδράσεις λαμβάνουν χώρα σε μία διεργασία, αλλά μόνο τα συστατικά των ρευμάτων εισόδου και εξόδου, όπως φαίνεται στο παρακάτω παράδειγμα.

Παράδειγμα 5.11 Χρήση των Στοιχειακών Ισοζυγίων κατά την Επίλυση ενός Προβλήματος Καταλυτικής Πυρόλυσης Πετρελαίου

Η καταλυτική πυρόλυση πετρελαίου, είναι πολύ σημαντική και χρησιμοποιείται κατά την μετατροπή βαρέων κλασμάτων χαμηλής αξίας σε χαμηλότερου μοριακού βάρους υδρογονάνθρακες μεγαλύτερης αξίας. Πραγματοποιείται με υδρογόνωση της τροφοδοσίας, παρουσία ζεόλιθου σαν καταλύτη σε υψηλή θερμοκρασία και πίεση. Ερευνητές που ασχολούνται με το πεδίο αυτό μελετούν τη διάσπαση με τη μέθοδο των καθαρών συστατικών όπως το οκτάνιο (C_8H_{18}), ώστε να κατανοήσουν την συμπεριφορά των αντιδράσεων πυρόλυσης. Σε ένα τέτοιο πείραμα τα προϊόντα είχαν την εξής σύσταση σε ποσοστό mole: C_3H_8 19.5%, C_4H_{10} 59.4% και C_5H_{12} 21.1%. Σας ζητείται να υπολογίσετε την γραμμομοριακή αναλογία του υδρογόνου που καταναλώθηκε προς το οκτάνιο που αντέδρασε για το πείραμα αυτό.

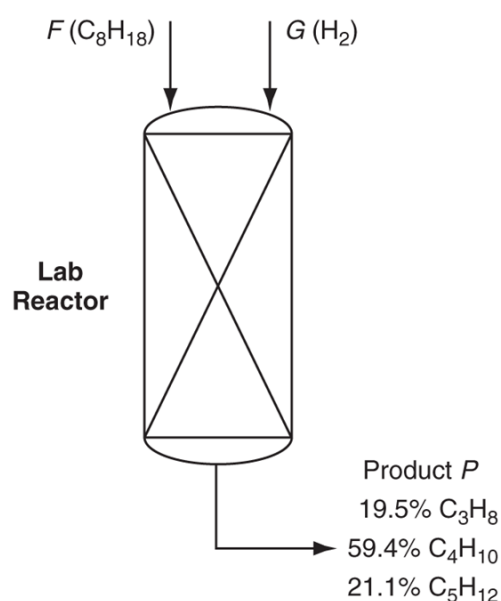
Λύση

Θα χρησιμοποιήσουμε τα στοιχειακά ισοζύγια για να επιλύσουμε το πρόβλημα αυτό, αφού οι χημικές αντιδράσεις που περιλαμβάνονται στην διεργασία δεν είναι καθορισμένες.

Βήματα 1 – 4

Το Σχήμα E5.11 αποτελεί μία γραφική απεικόνιση του εργαστηριακού αντιδραστήρα της πυρόλυσης μαζί με τα αντίστοιχα δεδομένα των ρευμάτων. Θεωρούμε πως είναι μια ανοιχτή αντίδραση σταθερής κατάστασης.

Σχήμα E5.11



Lab reactor: εργαστηριακός αντιδραστήρας

Product: προϊόν

Βήμα 5

Βάση: P = 100 g mol

Βήματα 6 και 7

Η ανάλυση των βαθμών ελευθερίας είναι

Μεταβλητές: 3 F, G, P

Καθώς έχει επιλεγεί ως βάση το P = 100 g mol, υπάρχουν δύο άγνωστοι: G και P

Εξισώσεις που απαιτούνται: 2

Στοιχειακά ισοζύγια: 2 H, C

Άρα το πρόβλημα έχει μηδέν βαθμούς ελευθερίας

Βήματα 8 και 9

Τα στοιχειακά ισοζύγια μετά από την εισαγωγή των προδιαγραφών και της βάσης είναι (οι μονάδες είναι σε gram moles):

$$\text{C: } F(8) + G(0) = 100 [(0.195)(3) + (0.594)(4) + (0.211)(5)]$$

$$\text{H: } F(18) + G(2) = 100 [(0.195)(8) + (0.594)(10) + (0.211)(12)]$$

Και η επίλυση του αυτού του συστήματος των γραμμικών εξισώσεων δίνει:

$$F = 50.2 \text{ g mol} \quad G = 49.8 \text{ g mol}$$

Η αναλογία

$$\frac{\text{H}_2 \text{ που καταναλώθηκε}}{\text{C}_8\text{H}_{18} \text{ που αντέδρασε}} = \frac{49.8 \text{ g mol}}{50.2 \text{ g mol}} = 0.992$$

Βήμα 10

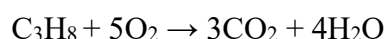
$$\text{Επαλήθευση: } 50.2 + 49.8 = P = 100 \text{ g mol}$$

Παράδειγμα 5.12 Περίσσεια Αέρα

Γίνεται αξιολόγηση καυσίμων για οχήματα εκτός της βενζίνης, επειδή προκαλούν τον σχηματισμό ρυπαντών σε χαμηλότερα επίπεδα. Το συμπιεσμένο προπάνιο είναι έχει προταθεί ως πηγή ενέργειας για οχήματα. Έστω ότι σε μία δοκιμή 20 Kg C₃H₈ καίγονται με 400 kg αέρα με αποτέλεσμα τον σχηματισμό 44 kg CO₂ και 12 Kg CO. Πόσο ήταν το ποσοστό της περίσσειας αέρα;

Λύση

Το πρόβλημα αυτό περιλαμβάνει την παρακάτω χημική αντίδραση (είναι η εξίσωση της αντίδρασης συμπληρωμένη;)



Βάση: 20 kg CO₂

Αφού το ποσοστό της περίσσειας αέρα βασίζεται στην πλήρη καύση του C₃H₈ προς CO₂ και H₂O, το γεγονός ότι η καύση δεν είναι πλήρης δεν έχει καμία επίδραση στον υπολογισμό της περίσσειας αέρα. Το απαιτούμενο O₂ στη βάση των 20 kg C₃H₈ είναι:

$$\frac{20 \text{ kg C}_3\text{H}_8}{1} \left| \frac{1 \text{ kg mol C}_3\text{H}_8}{44.09 \text{ kg C}_3\text{H}_8} \right| \frac{5 \text{ kg mol O}_2}{1 \text{ kg mol C}_3\text{H}_8} = 2.27 \text{ kg mol O}_2$$

Το O₂ που εισάγεται είναι:

$$\frac{400 \text{ kg αέρα}}{1} \left| \frac{1 \text{ kg mol αέρα}}{29 \text{ kg αέρα}} \right| \frac{21 \text{ kg mol O}_2}{100 \text{ kg mol αέρα}} = 2.90 \text{ kg mol O}_2$$

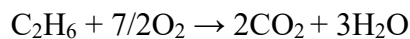
Το ποσοστό της περίσσειας αέρα είναι:

$$100 \frac{\text{περίσσεια O}_2}{\text{O}_2 \text{ που απαιτείται}} = 100 \frac{\text{O}_2 \text{ που εισέρχεται στην διεργασία} - \text{O}_2 \text{ που απαιτείται}}{\text{O}_2 \text{ που απαιτείται}}$$

$$\% \text{ περίσσεια αέρα} = \frac{2.90 \text{ lb mol O}_2 - 2.27 \text{ lb mol O}_2}{2.27 \text{ lb mol O}_2} \left| \frac{100}{1} \right| = 28\%$$

Κατά τον υπολογισμό της ποσότητας της περίσσειας του αέρα, να θυμάστε ότι η περίσσεια είναι η ποσότητα του αέρα που εισάγεται στην διεργασία της καύσης που είναι μεγαλύτερη από αυτήν που απαιτείται για πλήρη καύση. Έστω ότι υπάρχει κάποια ποσότητα οξυγόνου στο υλικό που καίγεται. Για παράδειγμα, έστω ότι ένα αέριο που περιέχει 80% C₂H₆ και 20% O₂ καίγεται σε μία μηχανή με περίσσεια αέρα 200%. Το 80% του αιθανίου μετατρέπεται σε CO₂, 10% σε CO και το 10% παραμένει άκαυστο. Ποιο είναι το ποσό της περίσσειας αέρα ανά 100 moles C₂H₆; Αρχικά, μπορείτε να αγνοήσετε τις πληροφορίες για το CO και το άκαυστο αιθάνιο γιατί η βάση του υπολογισμού της περίσσειας αέρα είναι η *πλήρης καύση* του C₂H₆. Συγκεκριμένα θεωρούμε πως τα προϊόντα της αντίδρασης βρίσκονται στο ανώτερο στάδιο οξειδωσης. Για παράδειγμα ο C μετατρέπεται σε CO₂, το S σε SO₂, το H₂ σε H₂O, το CO σε CO₂ κ.τ.λ.

Στη συνέχεια δεν μπορεί να αγνοηθεί το οξυγόνο που υπάρχει στο καύσιμο. Σύμφωνα με την αντίδραση



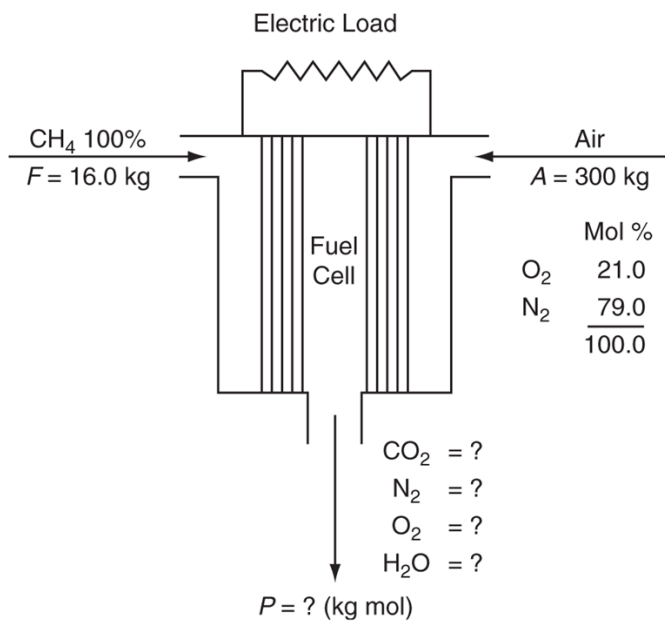
80 moles C₂H₆ απαιτούν 3.5(80) = 280 moles O₂ για πλήρη καύση. Ωστόσο, το αέριο περιέχει 20 moles O₂, έτσι ώστε μόνο 280 – 20 = 260 moles O₂ του εισερχόμενου αέρα, να απαιτούνται για πλήρη καύση. Έτσι, το απαιτούμενο O₂ είναι 260 moles, και ο υπολογισμός της περίσσειας 200% του O₂ (αέρα) γίνεται με βάση τα 260 και όχι τα 280 moles του O₂.

Εισερχόμενα μαζί με τον αέρα	moles O ₂
Απαιτούμενο O ₂ :	260
Περίσσεια O ₂ (2.00)(260):	<u>520</u>
Ολικό O ₂	780

Παράδειγμα 5.13 Παραγωγή Ηλεκτρισμού από Μεθάνιο σε Κυψέλη Καυσίμου

«Μία Κυψέλη Καυσίμου σε Κάθε Αυτοκίνητο», ήταν ο τίτλος άρθρου στο περιοδικό *Chemical and Engineering News*, (5 Μαρτίου 2001, σελ. 19). Πρακτικά, η κυψέλη καυσίμου είναι ένα ανοιχτό σύστημα το οποίο τροφοδοτείται με καύσιμο και αέρα, και παράγεται ηλεκτρισμός και κάποια μη χρήσιμα προϊόντα. Στο Σχήμα E5.13 απεικονίζεται μία κυψέλη καυσίμου προς την οποία υπάρχει συνεχής ροή μεθανίου (CH₄) και αέρα (O₂ συν N₂) με αποτέλεσμα την παραγωγή ηλεκτρισμού, CO₂ και H₂O. Ειδικές μεμβράνες και καταλύτες είναι απαραίτητα για την ενίσχυση της χημικής αντίδρασης του CH₄.

Σχήμα E5.13



Electric load: Ηλεκτρικό φορτίο

Fuel cell: Κυψέλη καυσίμου

Air: Αέρας

Με βάση τα δεδομένα του Σχήματος E5.13, σας ζητείται να υπολογίσετε την σύσταση των προϊόντων στο P.

Λύση

Βήματα 1 – 4

Πρόκειται για μια διεργασία σταθερής κατάστασης, με αντίδραση. Μπορείτε να υποθέσετε ότι η αντίδραση είναι πλήρης; Μπορείτε. Πως; Δεν υπάρχει καθόλου CH₄ στο P. Το σύστημα είναι η κυψέλη καυσίμου (ανοιχτό, σταθερής κατάστασης). Αφού το προϊόν της διεργασίας είναι αέριο, η σύσταση θα πρέπει να εκφράζεται σε κλάσματα moles (ή σε moles), και γι' αυτό θα χρησιμοποιήσουμε kg moles αντί για μάζα αν και οι ποσότητες του CH₄ και του αέρα εκφράζονται σε kg. Μπορείτε να κάνετε τις απαραίτητες προκαταρκτικές μετατροπές από kg σε kg moles ως εξής:

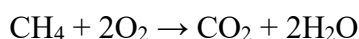
$$\frac{300 \text{ kg A}}{1} \left| \frac{1 \text{ kg mol A}}{29.0 \text{ kg A}} \right. = 10.35 \text{ kg mol A στην είσοδο}$$

$$\frac{16.0 \text{ kg CH}_4}{1} \left| \frac{1 \text{ kg CH}_4}{16 \text{ kg CH}_4} \right. = 1.00 \text{ kg mol CH}_4 \text{ στην είσοδο}$$

$$\frac{10.35 \text{ kg mol A}}{1} \left| \frac{0.21 \text{ kg mol O}_2}{1 \text{ kg mol A}} \right. = 2.17 \text{ kg mol O}_2 \text{ στο A}$$

$$\frac{10.35 \text{ kg mol A}}{1} \left| \frac{0.79 \text{ kg mol N}_2}{1 \text{ kg mol A}} \right. = 8.18 \text{ kg mol N}_2 \text{ στο A}$$

Η εξίσωση της χημικής αντίδρασης για το σύστημα αυτό μπορεί να θεωρηθεί πως είναι:



Βήμα 5

Θα επιλέξουμε μία βολική βάση

$$\begin{aligned} \text{Βάση: } 16.0 \text{ kg CH}_4 \text{ εισερχόμενου} &= 1 \text{ kg mol CH}_4 \text{ συν } 300 \text{ kg} \\ \text{A εισερχομένου} &= 10.35 \text{ kg mol αέρα} \end{aligned}$$

Βήματα 6 και 7

Η ανάλυση των βαθμών ελευθερίας είναι:

$$\text{Μεταβλητές: } 10 \quad F, P, A, n_{\text{CO}_2}^P, n_{\text{N}_2}^P, n_{\text{O}_2}^P, n_{\text{H}_2\text{O}}^P, n_{\text{O}_2}^A, n_{\text{N}_2}^A \text{ συν } \xi$$

Δεδομένης της βάσης και των ποσοτήτων που υπολογίστηκαν πιο πάνω, μπορούν να ανατεθούν τιμές σε τέσσερις από αυτές τις μεταβλητές (F, A, n_{O₂}^A και n_{N₂}^A). Επομένως μένουν τέσσερις άγνωστες μεταβλητές

Εξισώσεις: 6

Πέντε (5) ανεξάρτητα στοιχειακά ισοζύγια μάζας: CH₄, O₂, N₂, CO₂, H₂O

Μια (1) Πεπλεγμένη εξίσωση για το P: $\sum n_i^P = P$

Επομένως οι βαθμοί ελευθερίας είναι μηδέν.

Βήμα 8

Τα ισοζύγια μάζας των συστατικών είναι:

Ένωση	Έξοδος	=	Είσοδος	v _i ξ	=	g mol
CH ₄ :	$n_{CH_4}^P$	=	1.0	- ξ	=	0
O ₂ :	$n_{O_2}^P$	=	2.17	- 2ξ	=	0.17
N ₂ :	$n_{N_2}^P$	=	8.18	- 0(ξ)	=	8.18
CO ₂ :	$n_{CO_2}^P$	=	0	+ ξ	=	1.0
H ₂ O:	$n_{H_2O}^P$	=	0	+ 2ξ	=	2.0

Βήμα 9

Η λύση αυτής της ομάδας εξισώσεων δίνει

$$n_{CH_4}^P = 0, \quad n_{O_2}^P = 0.17, \quad n_{N_2}^P = 8.18, \quad n_{CO_2}^P = 1.0, \quad n_{H_2O}^P = 2.0, \quad P = 11.35$$

ενώ η ποσοστιαία σύσταση του P σε mole είναι

$$y_{O_2} = 1.5\%, \quad y_{N_2} = 72.1\%, \quad y_{CO_2} = 8.8\% \quad \text{και} \quad y_{H_2O} = 17.6\%$$

Μπορείτε επίσης να χρησιμοποιήσετε στοιχειακά ισοζύγια χωρίς να γνωρίζετε την αντίδραση για να πάρετε την ίδια λύση χρησιμοποιώντας τέσσερα στοιχειακά ισοζύγια και μία πεπλεγμένη εξίσωση για το P (το ξ δεν θα είναι πλέον μια μεταβλητή).

Βήμα 10

Μπορείτε να επαληθεύσετε την απάντηση προσδιορίζοντας την ολική μάζα του εξερχόμενου αερίου και συγκρίνοντάς την με την ολική εισερχόμενη μάζα (316 kg), αλλά θα παραλείψουμε το βήμα αυτό για να εξοικονομήσουμε χώρο.

Παράδειγμα 5.14 Καύση Λιγνίτη

Σε μία τοπική επιχείρηση καίγεται λιγνίτης με την ακόλουθη σύσταση, σε ξηρή βάση. (Σημειώστε ότι η παρακάτω στοιχειακή ανάλυση λιγνίτη διευκολύνει τους υπολογισμούς μας, αλλά δεν είναι απαραίτητα ο μοναδικός τύπος ανάλυσης λιγνίτη που υπάρχει. Μερικά είδη ανάλυσης περιέχουν πολύ λιγότερες πληροφορίες για το κάθε στοιχείο.)

Συστατικό	Ποσοστό
C	83.05
H	4.45
O	3.36
N	1.08
S	0.70
Τέφρα	7.36
Ολικά	100

Η μέση ανάλυση Orsat των καυσαερίων κατά τη διάρκεια ελέγχου 24 ωρών ήταν

Συστατικό	Ποσοστό
CO ₂ + SO ₂	15.4
CO	0.0
O ₂	4.0
N ₂	80.6
Ολικά	100.0

Το ποσοστό της υγρασίας (H₂O) στο καύσιμο ήταν 3.90%, ενώ ο αέρας περιείχε κατά μέσο όρο 0.0048 lb H₂O/ lb ξηρού αέρα. Τα απόβλητα περιείχαν 14.0% άκαυστο λιγνίτη ενώ το υπόλοιπο ήταν τέφρα. Θεωρούμε πως ο άκαυστος λιγνίτης που μένει στα απόβλητα έχει την ίδια σύσταση με το λιγνίτη που χρησιμοποιείται ως καύσιμο.

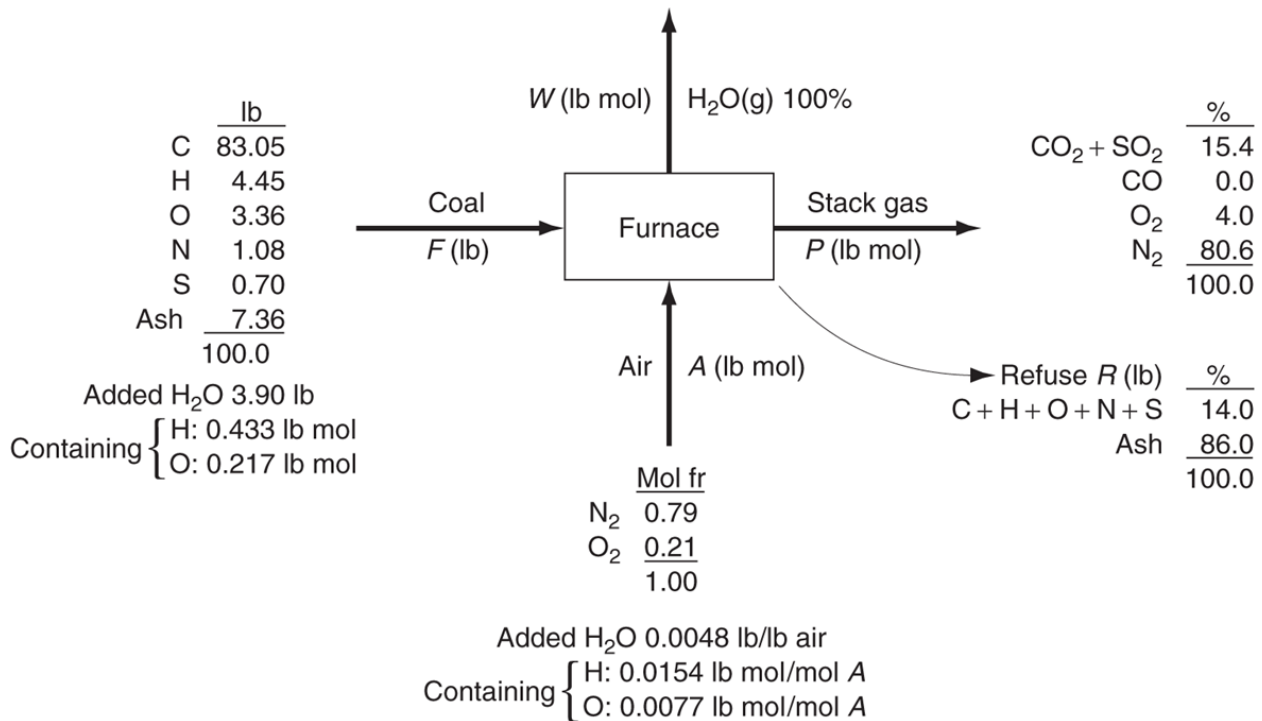
Πόσο ήταν το ποσοστό της περίσσειας του αέρα που χρησιμοποιήθηκε για τη διεργασία αυτή όπως φαίνεται στο Σχήμα 5.14;

Λύση

Σημειώστε πως για το πρόβλημα αυτό ζητήστε να βρείτε μόνο το ποσοστό της περίσσειας αέρα που χρησιμοποιείται. Επομένως το Σχήμα E5.14 περιέχει περισσότερες πληροφορίες απ' όσες χρειάζεται για να λύσετε το πρόβλημα.

Βήμα 1 – 4

Σχήμα E5.14



Furnace: κλίβανος

Coal: λιγνίτης

Stack gas: καυσαέριο

Added: προστιθέμενο

Containing: περιέχει

Mol fr: κλάσμα mol

Air: αέρας

Refuse: απόβλητα

Βήμα 5

Επιλέξτε την βολική βάση $F = 100$ lb

Βήμα 6 – 9

Πρέπει να επιλύσουμε ως προς το ρυθμό τροφοδοσίας του αέρα (A), αλλά για να το κάνουμε αυτό πρέπει πρώτα να επιλύσουμε ως προς τους άγνωστους ρυθμούς ροής R και P. Σημειώστε πως η τέφρα είναι συνδεδετικό συστατικό. Εφαρμόζοντας το ισοζύγιο μάζας για την τέφρα έχουμε:

$$7.36 = 0.86R \rightarrow R = 8.56 \text{ lb}$$

Σημειώστε πως ένα μέρος του λιγνίτη δεν αντιδρά και αφήνει τη διαδικασία στο ρεύμα R. Θα θεωρήσουμε εδώ πως το μέρος του R που δεν είναι τέφρα έχει την ίδια σύσταση με το F. Επομένως, απλά θα το αφαιρέσουμε από το F για να καθορίσουμε το ποσό του λιγνίτη που καίγεται.

$$\text{Ποσό λιγνίτη που καίγεται} = 100 - 0.14R = 98.8 \text{ lb}$$

Καθώς όλος ο C και το S στον λιγνίτη που καίγεται καταλήγει ως καυσαέριο (P), μπορούμε να γράψουμε τον παρακάτω ισοζύγιο mole για το C και το S:

moles C που καίγεται moles S που καίγεται moles των C+S στα καυσαέρια

$$\frac{(0.8305)(98.8)}{12} + \frac{(0.007)(98.8)}{12} = 0.154P$$

Επιλύοντας ως προς P έχουμε $P = 44.54 \text{ lb mol}$. Τώρα μπορούμε να εφαρμόσουμε ένα ισοζύγιο αζώτου για να καθορίσουμε το A χρησιμοποιώντας το ποσό του άνθρακα που καίγεται (98.8 lb):

N_2 στο F N_2 στο A N_2 στο P

$$\frac{(0.0108)(98.8)}{28} + 0.79 A = (0.806)(44.54)$$

Επιλύοντας την εξίσωση έχουμε $A = 45.39 \text{ lb mol}$

Για να υπολογίσουμε το ποσοστό της περίσσειας αέρα, εξαιτίας του οξυγόνου στον λιγνίτη που είναι διαθέσιμο για καύση και της παρουσίας άκαυστων καυσίμων, συμπεριλαμβανομένου του O, θα χρησιμοποιήσουμε τα συνολικό οξυγόνο που εισέρχεται και το οξυγόνο που απαιτείται όπως φαίνεται στην Εξίσωση 5.15

$$\% \text{ περίσσεια αέρα} = 100 \left(\frac{O_2 \text{ που εισέρχεται} - O_2 \text{ που απαιτείται}}{O_2 \text{ που απαιτείται}} \right)$$

Το απαιτούμενο O_2 είναι ίσο με τις στοιχειομετρικές απαιτήσεις για την πλήρη καύση του C του H και του S μείον το O_2 που υπάρχει στον λιγνίτη (χωρίς να βασίζεται σ' αυτό που καίγεται στην πραγματικότητα)

Συστατικό	Αντίδραση	lb	lb mol	Απαιτούμενο O ₂ (lb mol)
C	C + O ₂ → CO ₂	83.5	6.921	6.921
H	H ₂ + ½ O ₂ → H ₂ O	4.45	4.415	1.104
O	--	3.36	0.210	(0.105)
N	--	--	--	--
S	S + O ₂ → SO ₂	0.70	0.022	0.022
Σύνολο				7.942

Το οξυγόνο στον αέρα που εισέρχεται είναι $(45.39)(0.21) = 9532$ lb mol. Επομένως

$$\% \text{ περίσσεια αέρα} = 100 \left(\frac{9.532 - 7.942}{7.942} \right) = 20.0\%$$

Αν υπολογίσετε (λανθασμένα) το ποσοστό % της περίσσειας του αέρα μόνο από την ανάλυση των καυσαερίων σε υγρή βάση, θα έχετε αγνοήσει το οξυγόνο που υπάρχει στον λιγνίτη

Λεξιλόγιο Νέων Όρων

Αντιδρών σε περίσσεια Όλα τα αντιδρώντα εκτός από το περιοριστικό αντιδρών.

Απόδοση Με βάση την τροφοδοσία: Το ποσό (μάζα ή moles) ενός επιθυμητού προϊόντος προς το ποσό του βασικού (συνήθως του περιοριστικού) αντιδρώντος της τροφοδοσίας.

Με βάση την θεωρία: Το ποσό (μάζα ή moles) ενός προϊόντος που λαμβάνεται προς το θεωρητικό (αναμενόμενο) ποσό του προϊόντος που θα λαμβανόταν με βάση το περιοριστικό αντιδρών που καταναλώνεται πλήρως στην εξίσωση της χημικής αντίδρασης.

Με βάση το προϊόν που καταναλώνεται: Το ποσό (μάζα ή moles) ενός επιθυμητού προϊόντος προς το ποσό του βασικού (συνήθως του περιοριστικού) αντιδρώντος που καταναλώνεται.

Βαθμός μετατροπής Το ποσοστό του κλάσματος του περιοριστικού αντιδρώντος που μετατρέπεται σε προϊόντα.

Εκλεκτικότητα Η αναλογία των moles ενός συγκεκριμένου (συνήθως του επιθυμητού) προϊόντος προς τα moles ενός άλλου συνήθως μη επιθυμητού προϊόντος ή παραπροϊόντος, που παράγονται σε μία ομάδα εξισώσεων.

Έκταση αντίδρασης Τα mole των αντιδράσεων που πραγματοποιούνται σύμφωνα με την εξίσωση χημικής αντίδρασης.

Μετατροπή Το κλάσμα της τροφοδοσίας ή ενός βασικού στοιχείου της τροφοδοσίας που μετατρέπεται σε προϊόντα.

Περιοριστικό αντιδρών Το είδος σε μία τέλεια χημική αντίδραση που θεωρητικά θα εξαντλούνταν πρώτο (θα καταναλωνόταν πλήρως), ακόμη και αν η αντίδραση δεν πραγματοποιούνταν.

Στοιχειομετρία Αφορά υπολογισμούς για τα moles και τις μάζες των αντιδρώντων και προϊόντων που εμπλέκονται σε μια χημική αντίδραση (-εις).

Στοιχειομετρική αναλογία Το κλάσμα των mole που λαμβάνεται με χρήση των συντελεστών των ειδών μιας χημικής εξίσωσης και περιλαμβάνει τόσο τα αντιδρώντα όσο και τα προϊόντα.

Στοιχειομετρικός συντελεστής Δηλώνει τις σχετικές ποσότητες των moles των χημικών ειδών που αντιδρούν και σχηματίζονται σε μία χημική εξίσωση.