

Balance s chemickou reakcí? Jde to i bez fiktivních proudů!

Nejdříve definujeme základní pojmy a jejich značení:

Molární hmotnost M

M_i je molární hmotnost i -té složky. Jednotky jsou (kg- i /mol- i).

Hmotnostní zlomek w

$w_{i,j}$ je hmotnostní zlomek i -té složky v j -tém proudu. Jednotky jsou (kg- i /kg-proud- j). Pokud vynásobíme hmotnostní zlomek hmotností celého j -tého proudu ($w_{i,j}m_j$), dostaneme hmotnost i -té složky v tomto proudu.

Molární zlomek x

$x_{i,j}$ je molární zlomek i -té složky v j -tém proudu. Jednotky jsou (mol- i /mol-proud- j). Pokud vynásobíme molární zlomek látkovým množstvím celého j -tého proudu ($x_{i,j}n_j$), dostaneme počet molů i -té složky v tomto proudu.

Rozsah reakce ξ

ξ_k je rozsah k -té reakce, který udává kolikrát reakce proběhla. Jednotky jsou (mol-ro- k), tj. počet molů tzv. reakčních obrátů. Pokud vynásobíme rozsah reakce stechiometrickým koeficientem určité složky ($\nu_{i,k}\xi_k$), tak dostaneme počet molů této složky, který vznikl/zanikl danou reakcí.

Stechiometrický koeficient ν

$\nu_{i,k}$ je stechiometrický koeficient i -té složky v k -té reakci. Jeho hodnota je kladná pro produkty a záporná pro reaktanty příslušné reakce. Jednotky jsou (mol- i /mol-ro- k).

Konverze η

Konverze i -té složky (reaktantu) η_i je definována jako podíl množství složky, který zreagoval, k množství složky, které mohlo zreagovat (tj. množství na vstupu)

$$\eta_i \equiv \frac{\text{zreagované množství}}{\text{vstupující množství}} = \frac{|\nu_i|\xi}{n_{i,\text{in}}} = \frac{|\nu_i|\xi M_i}{m_{i,\text{in}}}$$

(pro zjednodušení zde uvažujeme pouze jednu reakci, a proto jsme vynechali index k u rozsahu reakce a stech. koeficientu). Konverze může nabývat hodnot od nuly (žádná reakce) do jedné (veškerý reaktant zreagoval) a často se konverze udává v procentech (η vynásobené 100).

Přebytek P

Přebytek je definován pro i -tou složku

$$\begin{aligned} P_i &\equiv \frac{\text{množství k dispozici (na vstupu)} - \text{množství teoreticky potřebné}}{\text{množství teoreticky potřebné}} = \\ &= \frac{m_{i,\text{in}} - m_{i,\text{teor}}}{m_{i,\text{teor}}} = \frac{n_{i,\text{in}} - n_{i,\text{teor}}}{n_{i,\text{teor}}}, \end{aligned}$$

kde teoreticky potřebné množství se vypočítá ze stechiometrie rovnice a skutečného množství ostatních reaktantů. Podle definice může P teoreticky nabývat hodnot od -1 do nekonečna, i když záporný přebytek se nepoužívá (záporná hodnota znamená vlastně nedostatek dané složky).

A teď uvedeme, jak budou vypadat vlastní bilance.

Hmotnostní bilance složky i

$$\sum_{j \in \text{vstup}} w_{i,j} m_j + \sum_{k=1}^{N_r} \nu_{i,k} \xi_k M_i = \sum_{j \in \text{výstup}} w_{i,j} m_j$$

(N_r je počet probíhajících reakcí, většinou bude pouze jedna a index k i sumu můžeme vynechat).

Hmotnostní bilance celková

$$\sum_{j \in \text{vstup}} m_j = \sum_{j \in \text{výstup}} m_j$$

(protože celková hmotnost se chemickou reakcí nemění, zdrojový člen se v celkové hmotnostní bilanci neobjeví.)

Látková bilance složky i

$$\sum_{j \in \text{vstup}} x_{i,j} n_j + \sum_{k=1}^{n_r} \nu_{i,k} \xi_k = \sum_{j \in \text{výstup}} x_{i,j} n_j$$

Látková bilance celková

$$\sum_{j \in \text{vstup}} n_j + \sum_{k=1}^{N_r} \left(\sum_{i=1}^N \nu_{i,k} \right) \xi_k = \sum_{j \in \text{výstup}} n_j$$

(N je počet složek. Pozor, celkové látkové množství se chemickou reakcí může změnit, a proto se nesmí zapomenout na zdrojový člen!)

Nakonec shrneme vše do tabulky:

Zdrojové členy odpovídající vzniku/zániku chemickou reakcí.
(Pro zjednodušení uvažujeme pouze jednu chemickou reakci.)

bilance	hmotnostní	látková
i -té složky	$\nu_i \xi M_i$	$\nu_i \xi$
celková	0	$\left(\sum_{i=1}^N \nu_i \right) \xi$