

Støkiometrisk koeffisient

Støkiometrisk koeffisient v_i negativ for reaktanter og positiv for produkter

Reaksjonsomfang

Definisjon ξ sier hvor langt en **reaksjon** har gått

Beregning $\xi_i = (\text{mol reaktant } A \text{ dannet/tapt i reaksjon } \square \text{ [mol, } \square \text{]}) / (\text{støkiometrisk koeffisient for } A \text{ i reaksjon } j) \text{ mol/s}$

For en reaksjon $\xi = (n_A - n_{A,0}) / \nu_A$

$$n_A = n_{A,0} + \nu_A \xi$$

Omsetningsgrad

Definisjon X_A fraksjonen av en gitt **reaktant** som omsettes

Enhet ingen, verdi mellom 0 og 1

Beregning $X_A = (\text{mol reaktant } A \text{ omsatt ved reaksjoner}) / (\text{mol reaktant } A \text{ tilført systemet})$

$$X_A = (n_{A,0} - n_A) / n_{A,0}$$

$$n_{A,0} - n_A = \sum_i \nu_{Ai} \xi_i$$

Ved en reaksjon $\xi = (n_A - n_{A,0}) / \nu_A = (-n_{A,0} X_A) / \nu_A$

Reaksjonsomfang vs. omsetningsgrad

ξ brukes som variabel ved beregninger.

ϕ brukes når man skal gi informasjon om en reaksjon

Resirkulasjonsforhold

Resirkulasjonsforholdet (total stoffmengde resirkulert) / (total stoffmengde frisk føde)

Begrensende reaktant (LR)

Definisjon reaktanten som begrenser den maksimale verdien av reaksjonsomfanget

Beregning $LR = \text{fødemengde} / \text{reaksjonskoeffisient } \nu$

$$\xi_{\max} = \min_i (n_{i,0} / |\nu_i|)$$

Selektivitet

Definisjon Φ er fraksjonen av omsatt reaktant som danner ønsket produkt.

Beregning $\phi = (\text{mol } A \text{ omsatt til ønsket produkt}) / (\text{mol } A \text{ omsatt totalt})$ (%)

$$\phi = (|\nu_{Aj}| \xi_j) / (\sum_i \nu_{Ai} \xi_i)$$

$$\phi = (\nu_{Aj} \xi_j) / (n_{A,0} - n_A)$$

$$n_{A,0} - n_A = \sum_i \nu_{Ai} \xi_i$$

Utbytte

Definisjon Y mengden ønsket produkt dannet som fraksjon av det teoretisk oppnåelige

Beregning $Y = (\text{mol } A \text{ omsatt til ønsket produkt}) / (\text{mol } A \text{ tilsatt})$ (%)

$$Y = (|\nu_{Aj}| \xi_j) / n_{A,0}$$

Atombalanser

Definisjon Det kan settes opp atombalanser for hver grunnstoff

Beregning $r = c_r - a$

r - antall uavhengige reaksjoner

c_r - antall komponenter i reaksjonen

a - antall uavhengige atombalanser

OBS: Inerte teller ikke med i beregninger