

FAKULTET KEMIJSKOG INŽENJERSTVA I
TEHNOLOGIJE

Zavod za reakcijsko inženjerstvo i katalizu

Kolegij: Bilanca tvari i energije

Bilance tvari u procesima sa kemijskom
reakcijom

1

TEMELJNI POJMOVI

Procesna shema



Specifikacija procesnih tokova – sastav i količina ili protoci
Pisanje jednažbi za bilancu tvari – za pojedine komponente
– ukupna bilanca tvari

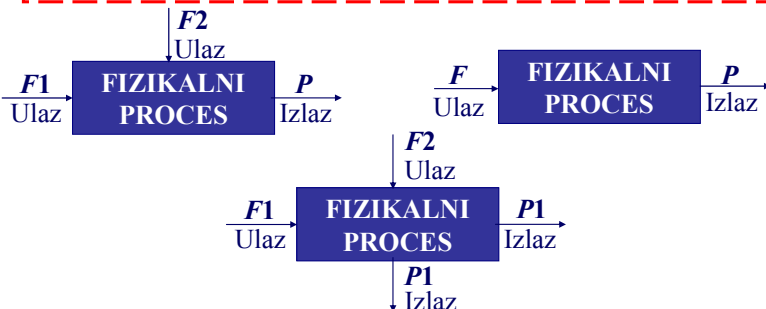
Pročitati pažljivo tekst zadatka
Razumjeti problem
Nacrtati shemu procesa
Poznati podaci o procesu, te naznačiti nepoznanice – jedinstveni simbol
Naznačiti ako postoje neki posebni odnosi među procesnim tokovima – dodatne jednažbe

2

FIZIKALNI PROCES

Opća bilanca tvari za fizikalni proces

$$\begin{array}{l} \text{ULAZ} \\ \text{TVARI} \end{array} - \begin{array}{l} \text{IZLAZ} \\ \text{TVARI} \end{array} \pm \begin{array}{l} \text{TVAR PROMIENJENA} \\ \text{REAKCIJOM} \end{array} = \begin{array}{l} \text{AKUMULACIJA} \\ \text{TVARI} \end{array}$$



3



FIZIKALNI PROCES



• Stacionarni

- Procesne varijable se ne mijenjaju s vremenom

$$\text{AKUMULACIJA} = 0$$

$$\frac{\text{ULAZ}}{\text{TVARI}} - \frac{\text{IZLAZ}}{\text{TVARI}} = 0$$

• Nestacionarni

- Procesne varijable se mijenjaju s vremenom

$$\text{AKUMULACIJA} \neq 0$$

$$\frac{\text{ULAZ}}{\text{TVARI}} - \frac{\text{IZLAZ}}{\text{TVARI}} = \frac{\text{AKUMULACIJA}}{\text{TVARI}}$$





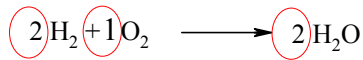
KEMIJSKI PROCES - TEMELJNI POJMOVI



Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

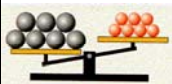
– STEHIOMETRIJSKA JEDNADŽBA

- Izjednačavanje reaktivnog broja molekula reaktanata i produkata koji sudjeluju u reakciji



– STEHIOMETRIJSKI KOEFICIJENTI

- STEHIOMETRIJSKI OMJER – omjer stehiometrijskih koeficijenata u jednadžbi reakcije



5



KEMIJSKI PROCES - TEMELJNI POJMOVI

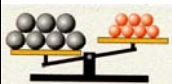


Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

– MNOŽINA TVARI

$$n = \frac{m}{M} \left[\frac{\text{kg}}{\text{kg/kmol}} = \text{kmol} \right]$$

- LIMITIRAJUĆI REAKTANT - (mjerodavni) reaktant koji prvi nestaje i koji je prisutan u manjoj količini (množini) od stehiometrijske prema drugom reaktantu
- O njemu ovisi maksimalna količina produkta
- Kad se on potroši, nema više reakcije



6

KEMIJSKI PROCES - TEMELJNI POJMOVI

Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

– SUVIŠAK REAKTANTA – ako je jedan reaktant limitirajući, tada je drugi u suvišku

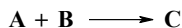
$$\text{Suvišak reaktanta} = \frac{n - n_s}{n_s}$$

7

KEMIJSKI PROCES - TEMELJNI POJMOVI

Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

– KONVERZIJA – dio reaktanta koji se u kemijskom procesu promijenio obzirom na početnu ili ulaznu (množinu) reaktanta (mjera za napredovanje reakcije)



$$X_A = \frac{n_{A0} - n_A}{n_{A0}}$$

Bezdimenzijska veličina (0 - 1 ili 0 - 100%)
Uvijek se odnosi na promjenu množine reaktanta

8

KEMIJSKI PROCES - TEMELJNI POJMOVI

Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

– SELEKTIVNOST – omjer množine ili mase nastalog produkta i množine ili mase neželjenog produkta



$$S = \frac{n_P \text{ molovi željeni produkt}}{n_P \text{ molovi neželjeni produkt}}$$

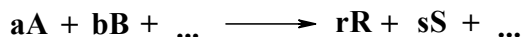
Bezdimenzijska veličina

9

KEMIJSKI PROCES - TEMELJNI POJMOVI

Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

– STUPANJ (DOSEG) REAKCIJE – dio reaktanta koji se izmijenio u kemijskoj reakciji



$$\xi = \frac{n_i - n_{i,0}}{\nu_i}$$

Stupanj reakcije računat preko bilo kojeg reaktanta ili produkta je jednak

$$\xi = \frac{\Delta n_A}{\nu_A} = \frac{\Delta n_B}{\nu_B} = \dots = \frac{\Delta n_R}{\nu_R} = \frac{\Delta n_S}{\nu_S}$$

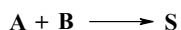
$$\nu_A = -a; \nu_B = -b; \nu_R = r; \nu_S = s$$

10

KEMIJSKI PROCES - TEMELJNI POJMOVI

Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

– ISKORIŠTENJE REAKCIJE – omjer stvarne množine ili mase produkta i teorijski moguće množine ili mase produkta



A – ključni reaktant



S – korisni produkt

R – neželjeni produkt

$$I = \frac{n_P \text{ stvarno nastali molovi}}{n_P \text{ teorijski moguće nastali molovi}}$$

Odnosi se na pretvorbu ključnog reaktanta u određeni korisni produkt.

Teorijska količina produkta nastaje ako sav mjerodavni reaktant izreagira u željeni produkt.

11

KEMIJSKI PROCES - TEMELJNI POJMOVI

Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

METODE RJEŠAVANJA BILANCE TVARI S KEMIJSKOM REAKCIJOM:

Metoda bilance molekula
Metoda bilance atoma
Metoda stupnja reakcije

- Sve tri metode daju iste rezultate
- Izbor ovisi o korisniku
- Metoda bilance molekula studentima najbliža

12

KEMIJSKI PROCES

Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

Metoda bilance molekula

Bilanca tvari se postavlja za reaktante i/ili produkte

VAŽNO

Množina ili masa molekula reaktanta (produkta) na ulazu u proces nije jednaka masi ili množini molekula molekula reaktanta (produkta) na izlazu iz procesa.

13

KEMIJSKI PROCES

Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

Metoda bilance molekula

Reaktant:

$$\begin{array}{r} \text{ULAZ} - \text{IZLAZ} - \text{TVAR PROMIJENJENA} \\ \text{TVARI} - \text{TVARI} - \text{REAKCIJOM} \end{array} = 0$$

Produkt:

$$\begin{array}{r} \text{ULAZ} - \text{IZLAZ} + \text{TVAR PROMIJENJENA} \\ \text{TVARI} - \text{TVARI} - \text{REAKCIJOM} \end{array} = 0$$

- uzeti u obzir nastajanje ili nestajanje pojedinih tvari tijekom procesa
- zakon očuvanja mase uključuje masu svi tvari koje sudjeluju u procesu – dakle i one koje nastaju

14

KEMIJSKI PROCES

Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

Metoda bilance atoma

Opći oblik bilance atoma u procesu s kemijskom reakcijom je:

$$\begin{array}{r} \text{ULAZ} = \text{IZLAZ} \\ \text{TVARI} - \text{TVARI} \end{array}$$

VAŽNO

Množina ili masa atoma tvari na ulazu u proces je jednaka masi ili množini atoma tvari na izlazu iz procesa.



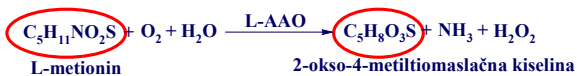
15



KEMIJSKI PROCES - PRIMJER

Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

METODA BILANCE MOLEKULA



Baza: 100 kg L-metionina



$M_{\text{metionin}} = 149,21 \text{ kg/kmol}$
 $M_{\text{ketokis}} = 148,00 \text{ kg/kmol}$

19



KEMIJSKI PROCES - PRIMJER

Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

METODA BILANCE MOLEKULA

Ukupna bilanca tvari

$$F = P$$

Bilanca za L-metionin

$$n_{\text{L-met}}^F - n_{\text{L-met}}^P - n_{\text{L-met, izreagirao}} = 0 \quad (n_{\text{L-met}}^F = 0)$$

$$n_{\text{L-met}}^F = n_{\text{L-met, izreagirao}}$$

$$n_{\text{L-met, izreagirao}} = \frac{m_{\text{L-met}}}{M_{\text{L-met}}} = \frac{100 \text{ kg}}{149,21 \text{ kg/kmol}} = 0,670 \text{ kmol}$$

20



KEMIJSKI PROCES - PRIMJER

Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

METODA BILANCE MOLEKULA

Bilanca za keto kiselinu (2-okso-4-metiltiomiaslaćna kiselina)

$$n_{2\text{-okso}}^F - n_{2\text{-okso}}^P + n_{2\text{-okso, nastalo reakcijom}} = 0 \quad (n_{2\text{-okso}}^F = 0)$$

$$n_{2\text{-okso}}^P = n_{2\text{-okso, nastalo reakcijom}}$$

$$n_{2\text{-okso, nastalo reakcijom}} = \frac{1 \text{ kmol } 2\text{-okso}}{1 \text{ kmol L-metionin}} \cdot n_{\text{L-met, izreagirao}}$$

$$n_{2\text{-okso, nastalo reakcijom}} = 0,670 \text{ kmol}$$

$$m_{2\text{-okso, nastalo reakcijom}} = n_{2\text{-okso}} \cdot M_{2\text{-okso}} = 0,670 \text{ kmol} \cdot 148,00 \text{ kg/kmol}$$

$$m_{2\text{-okso}}^P = 99,2 \text{ kg}$$

21



KEMIJSKI PROCES - PRIMJER

Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

METODA BILANCE MOLEKULA

Bilanca za H₂O

$$n_{H_2O}^F = n_{H_2O, \text{ potrošeno reakcijom}}$$

$$n_{H_2O, \text{ potrošeno reakcijom}} = \frac{1 \text{ kmol } H_2O}{1 \text{ kmol L-met}} \cdot n_{L\text{-met, izreagiralo}}$$

$$n_{H_2O, \text{ potrošeno reakcijom}} = 0,670 \text{ kmol}$$

$$m_{H_2O, \text{ potrošeno reakcijom}} = n_{H_2O} \cdot M_{H_2O} = 0,670 \text{ kmol} \cdot 18,00 \text{ kg/kmol}$$

$$m_{H_2O, \text{ potrošeno reakcijom}} = 12,0 \text{ kg}$$

$$m_{H_2O}^F = 12,0 \text{ kg}$$



Bilanca za O₂

$$n_{O_2}^F = n_{O_2, \text{ potrošeno reakcijom}}$$

$$n_{O_2, \text{ potrošeno reakcijom}} = \frac{1 \text{ kmol } O_2}{1 \text{ kmol L-met}} \cdot n_{L\text{-met, izreagiralo}}$$

$$n_{O_2, \text{ potrošeno reakcijom}} = 0,670 \text{ kmol}$$

$$m_{O_2, \text{ potrošeno reakcijom}} = n_{O_2} \cdot M_{O_2} = 0,670 \text{ kmol} \cdot 32,00 \text{ kg/kmol}$$

$$m_{O_2, \text{ potrošeno reakcijom}} = 21,4 \text{ kg}$$

$$m_{O_2}^F = 21,4 \text{ kg}$$

22



KEMIJSKI PROCES - PRIMJER

Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

METODA BILANCE MOLEKULA

Bilanca za NH₃

$$n_{NH_3}^p = n_{NH_3, \text{ nastalo reakcijom}}$$

$$n_{NH_3, \text{ nastalo reakcijom}} = \frac{1 \text{ kmol } NH_3}{1 \text{ kmol L-met}} \cdot n_{L\text{-met, izreagiralo}}$$

$$n_{NH_3, \text{ nastalo reakcijom}} = 0,670 \text{ kmol}$$

$$m_{NH_3, \text{ nastalo reakcijom}} = n_{NH_3} \cdot M_{NH_3} = 0,670 \text{ kmol} \cdot 17,00 \text{ kg/kmol}$$

$$m_{NH_3}^p = 11,4 \text{ kg}$$

Bilanca za H₂O₂

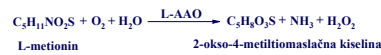
$$n_{H_2O_2}^p = n_{H_2O_2, \text{ nastalo reakcijom}}$$

$$n_{H_2O_2, \text{ nastalo reakcijom}} = \frac{1 \text{ kmol } H_2O_2}{1 \text{ kmol L-met}} \cdot n_{L\text{-met, izreagiralo}}$$

$$n_{H_2O_2, \text{ nastalo reakcijom}} = 0,670 \text{ kmol}$$

$$m_{H_2O_2, \text{ nastalo reakcijom}} = n_{H_2O_2} \cdot M_{H_2O_2} = 0,670 \text{ kmol} \cdot 34,00 \text{ kg/kmol}$$

$$m_{H_2O_2}^p = 22,8 \text{ kg}$$



KOMPONENTA	ULAZ / kg	IZLAZ / kg
L-metionin	100	-
Voda	12,0	-
O ₂	21,4	-
2-okso	-	99,2
Peroksid	-	22,8
NH ₃	-	11,4

Σ 133,4kg Σ 133,4 kg

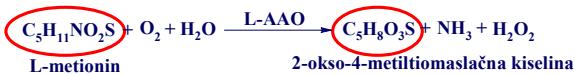
23



KEMIJSKI PROCES - PRIMJER

Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

METODA BILANCE ATOMA



Baza: 100 kg L-metionina



$M_{\text{metionin}} = 149,21 \text{ kg/kmol}$
 $M_{\text{ketosis}} = 148,00 \text{ kg/kmol}$

24



KEMIJSKI PROCES - PRIMJER

Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

METODA BILANCE ATOMA



L-metionin

2-okso-4-metiltiomaslačna kiselina

Bilanca C atoma

$$n_c^F = n_c^P$$

$$\frac{5 \text{ kmol C}}{1 \text{ kmol C}_5\text{H}_{11}\text{NO}_2\text{S}} \cdot n_{\text{C}_5\text{H}_{11}\text{NO}_2\text{S}}^F = \frac{5 \text{ kmol C}}{1 \text{ kmol C}_5\text{H}_8\text{O}_3\text{S}} \cdot n_{\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_3\text{S}}^P$$

$$n_{\text{C}_5\text{H}_{11}\text{NO}_2\text{S}}^F = \frac{m_{\text{C}_5\text{H}_{11}\text{NO}_2\text{S}}}{M_{\text{C}_5\text{H}_{11}\text{NO}_2\text{S}}} = \frac{100 \text{ kg}}{149,21 \text{ kg/mol}} = 0,670 \text{ kmol}$$

$$5 \cdot 0,670 \text{ kmol} = 5 \cdot n_{\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_3\text{S}}^P$$

$$n_{\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_3\text{S}}^P = 0,670 \text{ kmol}$$

$$m_{\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_3\text{S}}^P = 0,670 \text{ kmol} \cdot 148,0 \text{ kg/kmol} = 99,2 \text{ kg}$$

25



KEMIJSKI PROCES - PRIMJER

Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

METODA BILANCE ATOMA



L-metionin

2-okso-4-metiltiomaslačna kiselina

Bilanca N atoma

$$n_N^F = n_N^P$$

$$\frac{1 \text{ kmol N}}{1 \text{ kmol C}_5\text{H}_{11}\text{NO}_2\text{S}} \cdot n_{\text{C}_5\text{H}_{11}\text{NO}_2\text{S}}^F = \frac{1 \text{ kmol N}}{1 \text{ kmol NH}_3} \cdot n_{\text{NH}_3}^P$$

$$1 \cdot 0,670 \text{ kmol} = 1 \cdot n_{\text{NH}_3}^P$$

$$n_{\text{NH}_3}^P = 0,670 \text{ kmol}$$

$$m_{\text{NH}_3}^P = 0,670 \text{ kmol} \cdot 17 \text{ kg/kmol} = 11,4 \text{ kg}$$

26



KEMIJSKI PROCES - PRIMJER

Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

METODA BILANCE ATOMA



L-metionin

2-okso-4-metiltiomaslačna kiselina

Bilanca H atoma

$$n_H^F = n_H^P$$

$$\frac{11 \text{ kmol H}}{1 \text{ kmol C}_5\text{H}_{11}\text{NO}_2\text{S}} \cdot n_{\text{C}_5\text{H}_{11}\text{NO}_2\text{S}}^F + \frac{2 \text{ kmol H}}{1 \text{ kmol H}_2\text{O}} \cdot n_{\text{H}_2\text{O}}^F =$$

$$= \frac{8 \text{ kmol H}}{1 \text{ kmol C}_5\text{H}_8\text{O}_3\text{S}} \cdot n_{\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_3\text{S}}^F + \frac{3 \text{ kmol H}}{1 \text{ kmol NH}_3} \cdot n_{\text{NH}_3}^P + \frac{2 \text{ kmol H}}{1 \text{ kmol H}_2\text{O}_2} \cdot n_{\text{H}_2\text{O}_2}^P$$

$$n_{\text{H}_2\text{O}}^F = \frac{1 \text{ kmol H}_2\text{O}}{1 \text{ kmol C}_5\text{H}_{11}\text{NO}_2\text{S}} \cdot n_{\text{C}_5\text{H}_{11}\text{NO}_2\text{S}}^F = 0,670 \text{ kmol}$$

$$11 \cdot 0,670 \text{ kmol} + 2 \cdot 0,670 \text{ kmol} = 8 \cdot 0,670 \text{ kmol} + 3 \cdot 0,670 \text{ kmol} + 2 \cdot n_{\text{H}_2\text{O}_2}^P$$

$$n_{\text{H}_2\text{O}_2}^P = 0,670 \text{ kmol}$$

$$m_{\text{H}_2\text{O}_2}^P = 0,670 \text{ kmol} \cdot 34 \text{ kg/kmol} = 22,8 \text{ kg}$$

27



KEMIJSKI PROCES - PRIMJER

Bilanca tvari s jednom procesnom jedinicom i kemijskom reakcijom

METODA STUPNJA REAKCIJE

Količina keto kiseline (2-okso) može se izračunati preko stupnja reakcije:

$$q_{m,2-okso}^P = q_{m,2-okso}^F + \nu \cdot \xi \quad (q_{m,2-okso}^F = 0)$$

Kako je keto kiselina produkt, $\nu = 1$,

$$q_{m,2-okso}^P = 0 + 1 \cdot 0,536 \text{ kmol/h} = 0,536 \text{ kmol/h}$$

$$q_{2-okso}^P = q_{m,2-okso}^P \cdot M_{2-okso} = 0,536 \text{ kmol/h} \cdot 148,00 \text{ kg/kmol}$$

$$q_{2-okso}^P = 79,33 \text{ kg/h}$$
