

Cheming vzorce

By Jiří Zbytovský

Bilance

Konverze X , výtěžek Y , selektivita S , relativní selektivita S_{P/P^*} , rozsah ξ .
E, P atd. mohou být n, \dot{n}, c atd...

$$X = \frac{E^0 - E}{E^0} \quad (1)$$

$$S = \frac{P}{E^0 - E} \frac{\nu_E}{\nu_P} \quad (2)$$

$$Y = \frac{P}{E^0} \frac{\nu_E}{\nu_P} = X \cdot S \quad (3)$$

$$S_{P/P^*} = \frac{P}{P^*} \frac{\nu_{P^*}}{\nu_P} = \frac{r_P}{r_{P^*}} \quad (4)$$

$$\xi = \frac{n_A - n_A^0}{\nu_A} \quad (5)$$

Kinetika

Reakční rychlosti

$$R = \frac{d\xi}{d\tau} \quad (6)$$

$$R_i = R\nu_i \quad (7)$$

$$r = \frac{dR}{dV} \quad (8)$$

$$r_i = \frac{dR_i}{dV} \quad (9)$$

Michaelis-Menten: $E + S \rightleftharpoons ES \rightarrow P$

Odvození: $dc_{ES}/d\tau = 0, \quad c_E = c_E^0 - c_{ES}$

$$r_P = k_{MAX} \frac{c_S}{k_A + c_S} \quad (10)$$

Langmuir-Hinschelwood: $A + B \rightleftharpoons C$

$$Q = q + q_A + q_B + q_C \quad (11)$$

$$K_A = \frac{q_A}{qc_A} \quad (12)$$

$$q = \frac{Q}{1 + K_A c_A + K_B c_B + K_C c_C} \quad (13)$$

$$r = k_1 q_A q_B - k_2 q_C = k_1 K_A c_A K_B c_B q^2 - k_2 K_C c_C q \quad (14)$$

Freundlich isoterma

$$\frac{m_A}{m_{adsorbent}} = K p^{\frac{1}{n}} \quad (15)$$

Termodynamika

Závislost různých konstant na teplotě:

$$\frac{d \ln k}{dT} = \frac{\Delta H}{RT^2} \quad (16)$$

konstanta enthalpie	rovnovážná reakční	rychlostní aktivační energie	p^S výparná	Henry rozpouštěcí	adsorpční adsorpční
---------------------	--------------------	------------------------------	---------------	-------------------	---------------------

Bezrozměrná kritéria

Reynolds = poměr setrvačnosti a vazkých sil

$$Re = \frac{\rho v d}{\eta} \quad (17)$$

$$Re = \frac{\rho f d^2}{\eta} \quad (18)$$

Schmidt = poměr viskozity vůči difuzivitě

$$Sc = \frac{\nu}{D} = \frac{\eta}{\rho D} \quad (19)$$

Prandtl = poměr viskozity vůči tepelné difuzivitě

$$Pr = \frac{\nu}{D_T} = \frac{\eta/\rho}{\lambda/C_p/\rho} = \frac{\eta C_p}{\lambda} \quad (20)$$

Nusselt = poměr konvekce vůči kondukcii

$$Nu = \frac{\alpha d}{\lambda} \quad (21)$$

Sherwood = poměr konvekce vůči difúzi

$$Sh = \frac{K d}{D} \quad (22)$$

Výkonové kritérium

$$N_P = \frac{P}{\rho d^5 f^3} \quad (23)$$

Péclet = geometrie vůči koef. axiální disperze E

$$Pe = \frac{lv}{E} \quad (24)$$

Různé ingy

Adiabatický nárůst teploty v reaktoru

$$\Delta T_{AD} = \frac{-\Delta H_R c_A^0}{C_p \rho} X \quad (25)$$

Rektifikace – relativní tok nástřikovým patrem q a směrnice pomocné přímky k
 $1 =$ bod varu, $0 =$ rosný bod, $>1 =$ podchlazená kapalina, $<0 =$ přehřátá pára

$$q = \frac{\dot{n}'_L - \dot{n}_L}{\dot{n}_F} \quad (26)$$

$$k = \frac{q}{q - 1} \quad (27)$$

Přestup tepla a hmoty

$$\dot{Q} = \alpha A \Delta T \quad (28)$$

$$\dot{n} = k A \Delta c \quad (29)$$

$$\frac{1}{\alpha} = \frac{1}{\alpha_1} + \frac{d}{\lambda} + \frac{1}{\alpha_2} \quad (30)$$

$$\frac{1}{K_x} = \frac{1}{\beta_x} + \frac{1}{\beta_y m} \quad (31)$$

Pórovité látky a katalýza

Damköhler = poměr rychlosti reakce vůči přenosu hmoty, $c_{A,S}$ je c na povrchu katalyzátoru
druhé vyjádření je zjednodušení při $r = k S c_{A,S}$

$$\kappa = d \sqrt{\frac{r}{c_{A,S} D_{\text{eff}}}} = d \sqrt{\frac{k S}{D_{\text{eff}}}} \quad (32)$$

Viskózní tok v porézní částici, β je permabilita [m^2]

$$\dot{V} = \beta \frac{A \Delta p}{l \eta} \quad (33)$$

Turnover frequency TOF [s^{-1}], turnover number TON

$$\text{TOF} = r_{\text{reaction}} / c_{\text{active sites}} \quad (34)$$

$$\text{TON} = \text{TOF} \cdot \text{life expectancy} \quad (35)$$