



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ  
ΠΑΤΡΩΝ  
UNIVERSITY OF PATRAS

**ΑΝΟΙΚΤΑ** ακαδημαϊκά  
μαθήματα **ΠΠ**

---

ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ: **ΧΗΜΙΚΕΣ & ΒΙΟΧΗΜΙΚΕΣ  
ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ**

ΕΝΟΤΗΤΑ: 2<sup>ο</sup> Μέρος

ΟΝΟΜΑ ΚΑΘΗΓΗΤΗ: **ΑΘΑΝΑΣΙΑ ΤΕΚΕΡΛΕΚΟΠΟΥΛΟΥ**

ΤΜΗΜΑ: Τμήμα Διαχείρισης Περιβάλλοντος και Φυσικών  
Πόρων

ΑΓΡΙΝΙΟ

# Άδειες Χρήσης

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.



# Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Πατρών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ  
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



# ΑΘΑΝΑΣΙΑ ΤΕΚΕΡΛΕΚΟΠΟΥΛΟΥ

Λέκτορας

του Τμήματος Διαχείρισης Περιβάλλοντος  
& Φυσικών Πόρων

 26410 74204

 [atekerle@upatras.gr](mailto:atekerle@upatras.gr)

# ΤΑΞΙΝΟΜΗΣΗ ΤΩΝ ΧΗΜΙΚΩΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΕΩΝ

❖ Με βάση το μηχανισμό της αντίδρασης ή/και τον αριθμό των στοιχειομετρικών εξισώσεων ταξινομούνται:

- Αντιστρεπτές :  $A \rightleftharpoons B$
- Μη αντιστρεπτές :  $A \rightarrow B$
- Διαδοχικές ή σε σειρά :  $A \rightarrow B \rightarrow C$
- Ταυτόχρονες ή παράλληλες:  $A \begin{matrix} \nearrow B \\ \searrow C \end{matrix}$
- Πολύπλοκες ή μικτές :  $A \rightarrow B \begin{matrix} \rightarrow C \\ \searrow D \end{matrix}$
- Αυτοκαταλυόμενες :  $A \rightarrow P \rightarrow C+P$

- ❖ Με βάση τον αριθμό των μορίων που πραγματικά συμμετέχουν σε μια αντίδραση, δηλαδή τη μοριακότητα της αντίδρασης, οι αντιδράσεις διακρίνονται σε:
  - Μονομοριακές, διμοριακές, τριμοριακές, κλπ.
  
- ❖ Ανάλογα με τις θερμοκρασιακές συνθήκες που επικρατούν στον αντιδραστήρα οι χημικές αντιδράσεις διακρίνονται σε:
  - Ισοθερμοκρασιακές ή μη ισοθερμοκρασιακές, αδιαβατικές, κλπ.
  
- ❖ Ανάλογα με τον αριθμό των φάσεων που συνυπάρχουν στο χημικό αντιδραστήρα, οι χημικές αντιδράσεις διακρίνονται σε:
  - Ομογενείς (ύπαρξη μίας μόνο φάσης, αέριας, υγρής ή στερεάς)
  - Ετερογενείς (ύπαρξη περισσότερων φάσεων, π.χ. υγρή-στερεή, υγρή-αέρια-στερεή, κλπ.)
  
- ❖ Με βάση τη παρουσία ή μη κάποιου καταλύτη οι αντιδράσεις ταξινομούνται σε:
  - Καταλυτικές και μη καταλυτικές

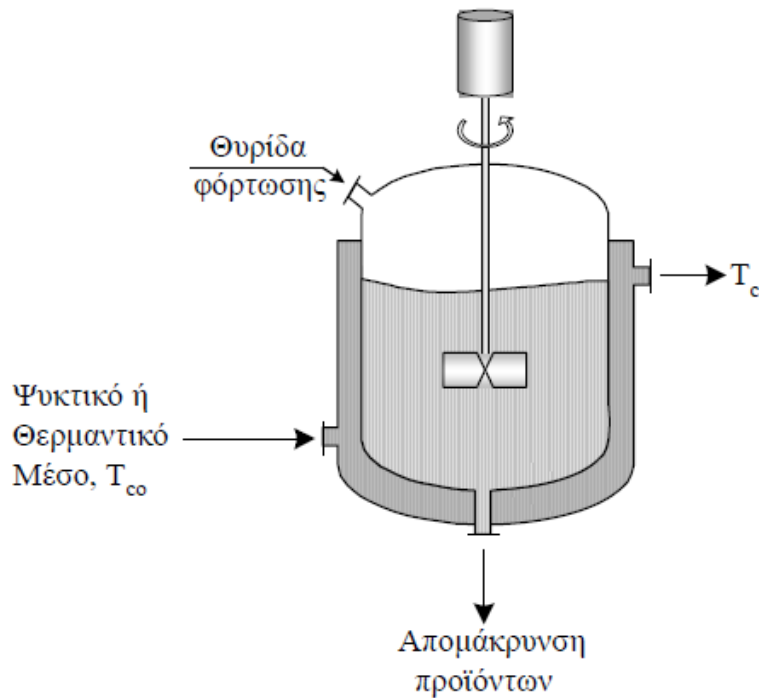
# ΤΑΞΙΝΟΜΗΣΗ ΤΩΝ ΧΗΜΙΚΩΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΩΝ

Οι χημικοί αντιδραστήρες μπορούν να ταξινομηθούν σε ορισμένες γενικές κατηγορίες ανάλογα:

- ❖ με τον τρόπο λειτουργίας τους
  - Αντιδραστήρες συνεχούς λειτουργίας
  - Αντιδραστήρες ημι-συνεχούς λειτουργίας
  - Αντιδραστήρες ασυνεχούς λειτουργίας
- ❖ τον αριθμό των φάσεων που συνυπάρχουν στον αντιδραστήρα
  - Ομογενείς Αντιδραστήρες
  - Ετερογενείς Αντιδραστήρες
- ❖ τα πρότυπα ροής και ανάπτυξης
  - Αντιδραστήρες Πλήρους ανάμιξης
  - Αντιδραστήρες Εμβολικής ροής
- ❖ τη μεταβολή ή όχι της θερμοκρασίας
  - Ισοθερμοκρασιακοί Αντιδραστήρες
  - Μη Ισοθερμοκρασιακοί Αντιδραστήρες

# ΒΑΣΙΚΟΙ ΤΥΠΟΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΩΝ

✓ Αντιδραστήρες ασυνεχούς λειτουργίας και πλήρους ανάμιξης (Batch reactor)



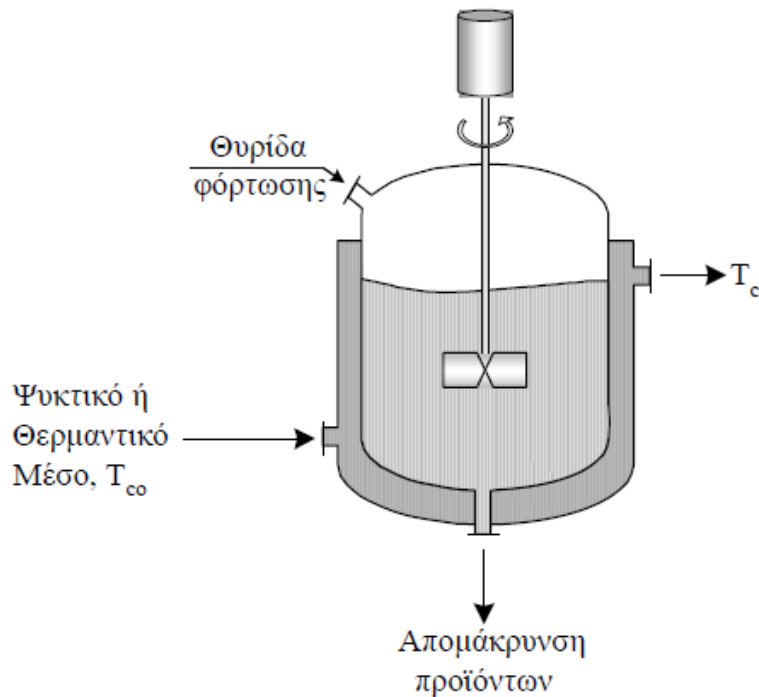
Χρησιμοποιούνται για αντιδράσεις που τελούνται σε υγρή φάση και στην παραγωγή μικρών ποσοτήτων ειδικών προϊόντων (φάρμακα, πολυμερή, κλπ).

Χαρακτηρίζονται από υψηλό κόστος λειτουργίας



# ΒΑΣΙΚΟΙ ΤΥΠΟΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΩΝ

- ✓ Αντιδραστήρες ασυνεχούς λειτουργίας και πλήρους ανάμιξης (Batch reactor)



## Πλήρης κύκλος

- ✓ Φόρτωση του αντιδραστήρα με τα αντιδρώντα υλικά
- ✓ Τέλεση της χημικής αντίδρασης (-σεων)
- ✓ Απομάκρυνση των προϊόντων της αντίδρασης
- ✓ Καθαρισμός και προετοιμασία του αντιδραστήρα

Το αντιδρών μίγμα αναδεύεται συνεχώς, έτσι ώστε η συγκέντρωση των αντιδρώντων και η θερμοκρασία να είναι ανεξάρτητες της θέσης στον αντιδραστήρα.

- ✓ Αντιδραστήρες ημι-συνεχούς λειτουργίας και πλήρους ανάμιξης (Semi-Batch reactor)

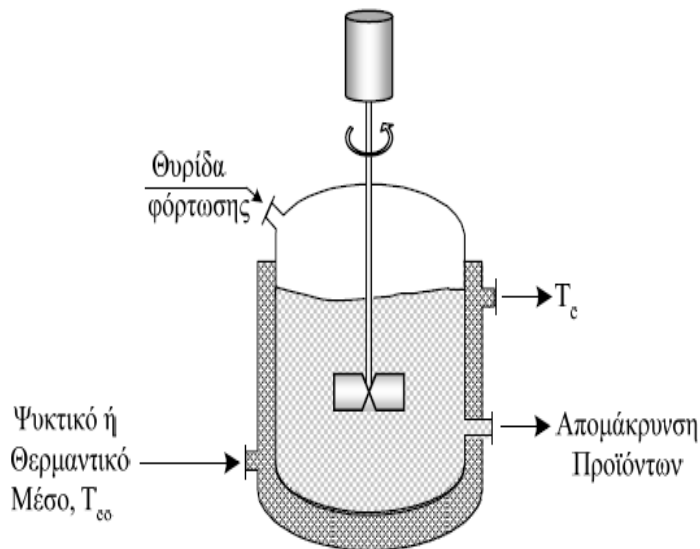
### Η ημι-συνεχής λειτουργία ενός αντιδραστήρα μπορεί να οφείλεται:

- ✓ Στη συνεχή απομάκρυνση των προϊόντων της αντίδρασης , (π.χ. , αερίων, στερεού ιζήματος), που σχηματίζονται κατά τη διάρκεια της λειτουργίας του αντιδραστήρα.
- ✓ Στη συνεχή προσθήκη ενός ή περισσοτέρων αντιδραστηρίων στον αντιδραστήρα.
- ✓ Στη συνεχή προσθήκη αντιδραστηρίων και ταυτόχρονη απομάκρυνση προϊόντων από τον αντιδραστήρα.

Ο ρυθμός εισαγωγής μάζας στο σύστημα δεν είναι ίσος με το ρυθμό απομάκρυνσης μάζας από αυτό.

Χαρακτηρίζονται για τους σχετικά χαμηλούς ρυθμούς παραγωγής και το υψηλό κόστος λειτουργίας τους.

✓ Αντιδραστήρες συνεχούς λειτουργίας και πλήρους ανάμιξης  
(Continuous Stirred Tank Reactor, CSTR)



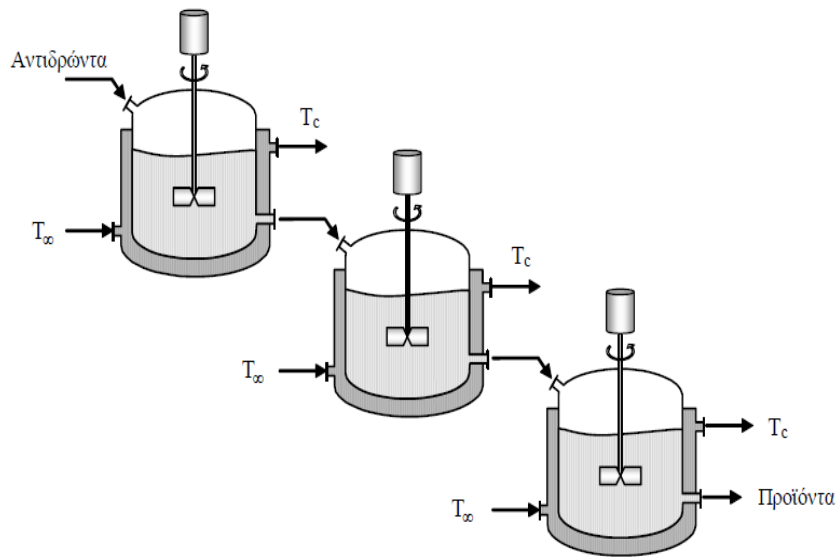
Κατάλληλο για τη διεξαγωγή χημικών αντιδράσεων που λαμβάνουν χώρα σε υγρή φάση.

Μόνιμη κατάσταση : η εισροή μάζας στον αντιδραστήρα είναι σταθερή και ίση με την εκροή μάζας απ' αυτόν.

Οι συγκεντρώσεις των αντιδρώντων και των προϊόντων, όπως επίσης η θερμοκρασία του αντιδρώντος μίγματος, είναι ανεξάρτητες της θέσης τους στο χώρο του αντιδραστήρα.

Η θερμοκρασία και οι συγκεντρώσεις όλων των συστατικών στην έξοδο του αντιδραστήρα είναι ίδιες με εκείνες που επικρατούν μέσα στον αντιδραστήρα.

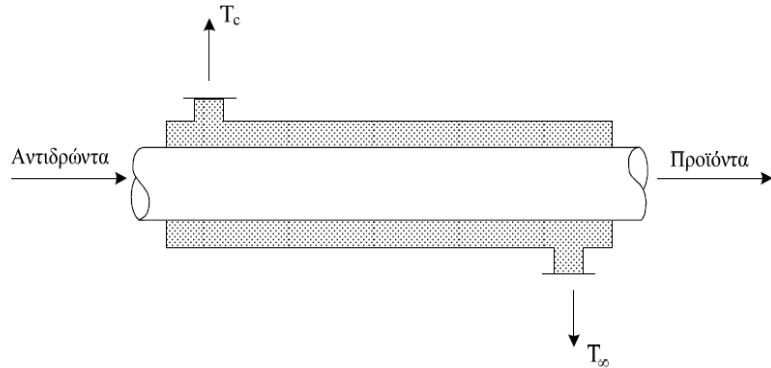
- ✓ Συστοιχία αντιδραστήρων συνεχούς λειτουργίας και πλήρους ανάμιξης (CSTR σε σειρά)



### Εφαρμογή όταν:

- ο απαιτούμενος όγκος του αντιδραστήρα είναι μεγάλος
- η αντίδραση είναι ισχυρά εξώθερμη
- Απαιτείται καλύτερη ανάμιξη και έλεγχος των συνθηκών αντίδρασης

✓ Αντιδραστήρες εμβολικής ροής / αυλωτοί αντιδραστήρες  
(Plug Flow Reactor, PFR)

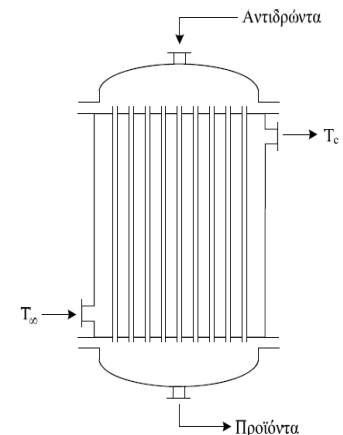


Οι συγκεντρώσεις των αντιδραστηρίων και η θερμοκρασία μεταβάλλονται κατά την αξονική κατεύθυνση, αλλά είναι ανεξάρτητες της ακτινικής τους θέσης στον αντιδραστήρα.

Απλός αυλός με/ή χωρίς μανδύα ψύξης-θέρμανσης

Κατηγορίες

Αντιδραστήρας του τύπου εναλλάκτης κέλυφος-αυλοί



## ✓ Ετερογενείς αντιδραστήρες

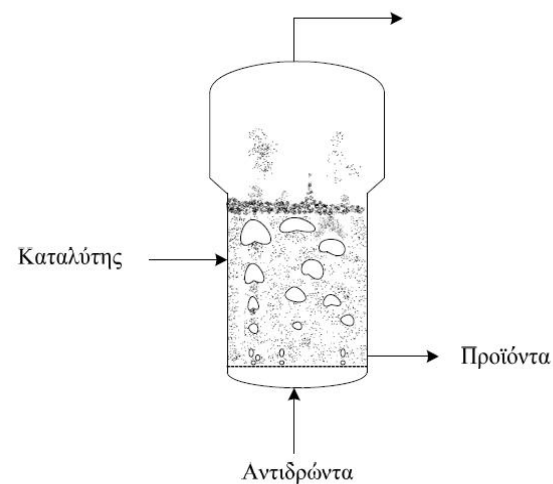
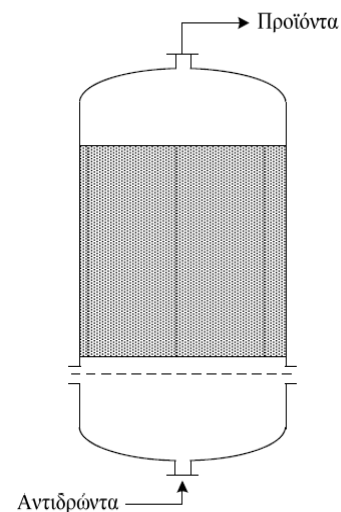
### ➤ Αντιδραστήρες σταθερής κλίνης (fixed bed reactors)

Τα κύρια πλεονεκτήματα των αντιδραστήρων αυτού του τύπου είναι:

- Δεν υπάρχουν μεγάλες θερμοκρασιακές διαφορές στην κλίνη, δηλαδή επιτυγχάνουμε άριστο έλεγχο της θερμοκρασίας.
- Η απομάκρυνση και αναγέννηση του καταλύτη μπορεί να γίνει χωρίς να σταματήσει η λειτουργία του αντιδραστήρα.

### ➤ Αντιδραστήρες ρευστοστερεάς κλίνης (fluidized bed reactors)

Υψηλό κόστος κατασκευής



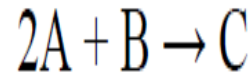
	Αντιδραστήρες ασυνεχούς λειτουργίας και πλήρους ανάμιξης (BR)	Αντιδραστήρες συνεχούς λειτουργίας και πλήρους ανάμιξης (CSTR)	Αντιδραστήρες συνεχούς λειτουργίας και καθόλου ανάμιξης (PFR, FBR)
<b>Φυσικά χαρακτηριστικά</b>	Κυλινδρικό δοχείο διαστάσεων $L/D \sim 1$	Κυλινδρικό δοχείο διαστάσεων $L/D \sim 1$	Αδειοί ή πληρωμένοι αυλοί διατεταγμένοι σε σειρά ή παράλληλα, διαστάσεων $L/D \gg 1$
<b>Λειτουργία</b>	Δυναμική	Μόνιμη κατάσταση (συνήθως)	Μόνιμη κατάσταση (συνήθως)
<b>Ανάμιξη</b>	Πλήρης	Πλήρης	Καθόλου ανάμιξη
<b>Βαθμός μετατροπής</b>	Υψηλός	Χαμηλός	Υψηλός
<b>Πλεονεκτήματα</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Υψηλοί ρυθμοί λειτουργίας</li> <li>• Ευκολόχρηστοι</li> <li>• Χαμηλό κόστος κατασκευής</li> <li>• Κατάλληλοι για μικρής κλίμακας παραγωγή</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ύπαρξη ισχυρής ανάδευσης</li> <li>• Καλός έλεγχος των συνθηκών λειτουργίας και ποιότητας των προϊόντων</li> <li>• Χαμηλό κόστος λειτουργίας</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Υψηλοί ρυθμοί λειτουργίας</li> <li>• Κατάλληλοι για αντιδράσεις σε υψηλές θερμοκρασίες και πιέσεις</li> <li>• Καλός έλεγχος των συνθηκών λειτουργίας</li> <li>• Χαμηλό κόστος λειτουργίας</li> </ul>
<b>Μειονεκτήματα</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Υψηλό κόστος λειτουργίας</li> <li>• Δυσκολία ακριβούς αναπαραγωγής των συνθηκών λειτουργίας</li> <li>• Δύσκολος έλεγχος της ποιότητας των προϊόντων</li> <li>• Ακατάλληλοι για μεγάλης κλίμακας παραγωγή</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Χαμηλοί ρυθμοί λειτουργίας</li> <li>• Υψηλό κόστος κατασκευής</li> <li>• Χαμηλοί ρυθμοί μεταφοράς θερμότητας ανά μονάδα όγκου</li> <li>• Δεν είναι κατάλληλοι για αντιδράσεις σε υψηλή πίεση</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Δύσκολος ο τοπικός έλεγχος της θερμοκρασίας για ισχυρά εξώθερμες αντιδράσεις</li> <li>• Υψηλό κόστος κατασκευής</li> <li>• Δυσκολία στον καθαρισμό αυλών</li> </ul>
<b>Εφαρμογές</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Αντιδράσεις σε υγρή φάση</li> <li>• Παραγωγή φαρμάκων</li> <li>• Παραγωγή προϊόντων ζύμωσης</li> <li>• Παραγωγή πολυμερών</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Μεγάλης κλίμακας συνεχής παραγωγή</li> <li>• Ομογενείς αντιδράσεις (υγρή φάση)</li> <li>• Έτερογενείς αντιδράσεις</li> <li>• Αντιδράσεις πολυμερισμού</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Μεγάλης κλίμακας συνεχής παραγωγή</li> <li>• Ομογενείς αντιδράσεις σε αέρια φάση</li> <li>• Καταλυτικές αντιδράσεις</li> </ul>

# Μεταβλητές Προόδου των Χημικών Αντιδράσεων

Για να παρακολουθήσουμε την πρόοδο μιας χημικής αντίδρασης είναι απαραίτητο να ορίσουμε μια μεταβλητή, η τιμή της οποίας θα μας παρέχει ένα μέτρο του βαθμού προόδου της χημικής αντίδρασης. Μια τέτοια μεταβλητή είναι και η **έκταση (extent)** ή **βαθμός προόδου (advancement)** της χημικής αντίδρασης.



# Μεταβλητές Προόδου των Χημικών Αντιδράσεων – Έκταση της Αντίδρασης



Νόμος ορισμένων αναλογιών

$$-\frac{1}{2} \frac{\delta N_A}{\delta t} = -\frac{\delta N_B}{\delta t} = \frac{\delta N_C}{\delta t}$$

Έκταση της αντίδρασης  
σε κλειστό σύστημα

$$\xi = \frac{\delta N_i}{\nu_i} = \frac{N_i - N_{i0}}{\nu_i} ; [\text{mol}]$$

$$N_i = N_{i0} + \nu_i \xi$$

Έκταση της αντίδρασης  
σε ανοιχτό σύστημα

$$F_i = F_{i0} + \nu_i \dot{\xi}$$

# Μεταβλητές Προόδου των Χημικών Αντιδράσεων – Βαθμός Μετατροπής της αντίδρασης

Η πρόοδος μιας χημικής αντίδρασης μπορεί επίσης να μετρηθεί με τη χρησιμοποίηση μιας άλλης εντατικής μεταβλητής που θα ονομάσουμε κλασματικό βαθμό μετατροπής,  $X_i$ , ή απλώς βαθμό μετατροπής. Σε ένα κλειστό σύστημα ο βαθμός μετατροπής,  $X_i$ , ενός αντιδρώντος συστατικού  $A_i$  ορίζεται ως:

$$X_i = \frac{N_{i0} - N_i}{N_{i0}}$$

Η μεταβλητή  $X_i$  αναφέρεται αποκλειστικά στο βαθμό μετατροπής του "i" αντιδρώντος συστατικού.

$$\xi = -\frac{N_{i0} X_i}{\nu_i}$$

# Συνάρτηση Συγκέντρωσης -Χρόνου

**Μηδενική τάξη:** Ο ρυθμός ανεξάρτητος των συγκεντρώσεων των αντιδρώντων.

$$r = -\frac{dC_A}{dt} = k_0$$

Η ολοκλήρωση με αρχική συνθήκη

$$C_A = C_{A0}$$

$$r = -\frac{dC_A}{dt} = k_0 \Rightarrow -\int_{C_{A0}}^{C_A} dC_A = k_0 \int_{t=0}^t dt \Rightarrow -(C_A - C_{A0}) = k_0 \cdot t$$

$$\Rightarrow C_A = C_{A0} - k \cdot t$$

Η συγκέντρωση ελαττώνεται γραμμικά με το χρόνο

ΧΡΟΝΟΣ ΗΜΙΖΩΗΣ ( $t_{1/2}$ )

$$C_A = C_{A0} / 2$$

$$\frac{C_{A0}}{2} = C_{A0} - k_0 \cdot t_{1/2} \Rightarrow k_0 \cdot t_{1/2} = \frac{C_{A0}}{2} \Rightarrow t_{1/2} = \frac{C_{A0}}{2 \cdot k_0}$$

# Συνάρτηση Συγκέντρωσης -Χρόνου

Πρώτη τάξη:

$$r = -\frac{dC_A}{dt} = k_1 \cdot C_A$$

Η ολοκλήρωση με αρχική συνθήκη

$$C_A = C_{A0}$$

$$\begin{aligned} r = -\frac{dC_A}{dt} = k_1 \cdot C_A &\Rightarrow -\int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A} = k_1 \int_{t=0}^t dt \Rightarrow -\ln C_A \Big|_{C_{A0}}^{C_A} = k_1 \cdot t \Rightarrow \\ &\Rightarrow -(\ln C_A - \ln C_{A0}) = k_1 \cdot t \Rightarrow \ln C_A - \ln C_{A0} = -k_1 \cdot t \Rightarrow \\ \ln \frac{C_A}{C_{A0}} = -k_1 \cdot t &\Rightarrow \frac{C_A}{C_{A0}} = e^{-k_1 \cdot t} \Rightarrow C_A = C_{A0} \cdot e^{-k_1 \cdot t} \end{aligned}$$

# Συνάρτηση Συγκέντρωσης -Χρόνου

Πρώτη τάξη:

$$r = -\frac{dC_A}{dt} = k_1 \cdot C_A$$

$$C_A = C_{A0} \cdot e^{-k_1 \cdot t}$$

ΧΡΟΝΟΣ ΗΜΙΖΩΗΣ ( $t_{1/2}$ )

$$C_A = C_{A0} / 2$$

$$\frac{C_{A0}}{2} = C_{A0} \cdot e^{-k_1 \cdot t_{1/2}} \Rightarrow \frac{1}{2} = e^{-k_1 \cdot t_{1/2}} \Rightarrow \ln \frac{1}{2} = -k_1 \cdot t_{1/2} \Rightarrow$$

$$k_1 \cdot t_{1/2} = -\ln \frac{1}{2} \Rightarrow t_{1/2} = \frac{-\ln \frac{1}{2}}{k_1}$$

# Συνάρτηση Συγκέντρωσης -Χρόνου

Δεύτερη τάξη:

$$r = -\frac{dC_A}{dt} = k_2 \cdot C_A^2$$

ΤΥΠΟΣ Ι

A + A  $\longrightarrow$  Προϊόντα

Η ολοκλήρωση με  
αρχική συνθήκη

$$C_A = C_{A0}$$

$$r = -\frac{dC_A}{dt} = k_2 \cdot C_A^2 \Rightarrow -\int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A^2} = k_2 \int_{t=0}^t dt \Rightarrow -\left(-\frac{1}{C_A}\right) \Big|_{C_{A0}}^{C_A} = k_2 \cdot t \Rightarrow$$
$$\Rightarrow -\left(-\frac{1}{C_A} + \frac{1}{C_{A0}}\right) = k_2 \cdot t \Rightarrow \frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A0}} = k_2 \cdot t \Rightarrow$$

$$\frac{1}{C_A} = \frac{1}{C_{A0}} + k_2 \cdot t$$

ΧΡΟΝΟΣ ΗΜΙΖΩΗΣ ( $t_{1/2}$ )

$$C_A = C_{A0} / 2$$

# Συνάρτηση Συγκέντρωσης -Χρόνου

Δεύτερη τάξη:

$$r = -\frac{dC_A}{dt} = k_2 \cdot C_A \cdot C_B \quad (1)$$

ΤΥΠΟΣ II



Αρχική συνθήκη

$$C_A = C_{A0}$$

Εάν  $\xi$  η έκταση της αντίδρασης τότε:

$$N_A = N_{A0} - \alpha \cdot \xi$$

$$N_B = N_{B0} - b \cdot \xi$$

Διαιρώ με τον όγκο  $V$   
(σταθερός) οπότε:

$$C_A = C_{A0} - \alpha/V \cdot \xi \quad (2)$$

$$C_B = C_{B0} - b/V \cdot \xi \quad (3)$$

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{d\left(C_{A0} - \frac{\alpha}{V} \cdot \xi\right)}{dt} = \frac{dC_{A0} - \frac{\alpha}{V} d\xi}{dt} = -\frac{\alpha}{V} \frac{d\xi}{dt} \Rightarrow \frac{dC_A}{dt} = -\frac{\alpha}{V} \frac{d\xi}{dt} \quad (4)$$

Αντικαθιστώ την (2), (3), (4) στην (1) :

$\alpha A + bB$ 

Προϊόντα

$$\frac{a}{V} \frac{d\xi}{dt} = k_2 \cdot \left[ \left( C_{A0} - \frac{a}{V} \cdot \xi \right) \cdot \left( C_{B0} - \frac{b}{V} \cdot \xi \right) \right]$$

Για  $t=0$   $\longrightarrow \xi=0$ 

$$\text{Για } t \longrightarrow \xi = \frac{(C_{A0} - C_A) \cdot V}{a}$$

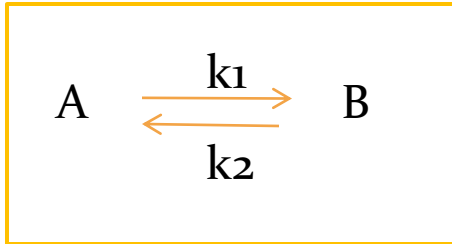
Οπότε:

$$\frac{1}{C_{B0} - \frac{b}{a} \cdot C_{A0}} \left[ \ln \frac{C_B}{C_A} - \ln \frac{C_{B0}}{C_{A0}} \right] = k_2 \cdot t$$



# Συνάρτηση Συγκέντρωσης -Χρόνου

## Αμφίδρομες αντιδράσεις



$$r = -\frac{dC_A}{dt} = k_1 \cdot C_A - k_1' \cdot C_B$$

Σε σταθερό όγκο και εφόσον ο αριθμός των moles είναι σταθερός

$$C_B = C_{B0} + (C_{A0} - C_A)$$

$$-\frac{dC_A}{dt} = k_1 \cdot C_A - k_1' \cdot [C_{B0} + (C_{A0} - C_A)] \Rightarrow$$

$$-\frac{dC_A}{dt} = (k_1 + k_1') \cdot C_A - k_1' \cdot [C_{A0} + C_{B0}]$$

(1)

Σε ισορροπία

$$k_1 \cdot C_{A,ισορ} = k_1' \cdot C_{B,ισορ} \Rightarrow \frac{C_{B,ισορ}}{C_{A,ισορ}} = \frac{k_1}{k_1'} = K_{ισορ} \Rightarrow k_1' = \frac{k_1}{K_{ισορ}} \quad (2)$$

Αντικαθιστώ την (2) στην (1):

$$-\frac{dC_A}{dt} = \left( k_1 + \frac{k_1}{K_{ισορ}} \right) \cdot C_A - \frac{k_1}{K_{ισορ}} \cdot (C_{A0} + C_{B0}) = k_1 \left( 1 + \frac{1}{K_{ισορ}} \right) \cdot C_A - \frac{k_1}{K_{ισορ}} \cdot [C_{A0} + C_{B0}] \Rightarrow$$

$$-\frac{dC_A}{dt} = k_1 \cdot \left[ \left( \frac{K_{ισορ} + 1}{K_{ισορ}} \right) \cdot C_A - \frac{1}{K_{ισορ}} (C_{A0} + C_{B0}) \right]$$

Σε μόνιμη κατάσταση

$$\frac{dC_A}{dt} = 0$$

$$\frac{K_{ισορ} + 1}{K_{ισορ}} \cdot C_{A,ισορ} = \frac{1}{K_{ισορ}} \cdot (C_{A0} + C_{B0})$$

$$(K_{ισορ} + 1) \cdot C_{A,ισορ} = (C_{A0} + C_{B0})$$

Συμπεπώς:

$$-\frac{dC_A}{dt} = k_1 \cdot \frac{K_{ισορ} + 1}{K_{ισορ}} (C_A - C_{A,ισορ}) \Rightarrow -\frac{dC_A}{dt} = k_1 \cdot \frac{K_{ισορ} + 1}{K_{ισορ}} \cdot C'_A$$

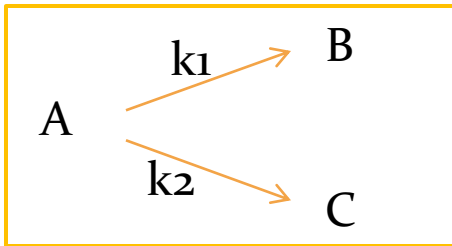
Λύνοντας την εξίσωση:

$$-\ln \frac{(C_A - C_{A,1\sigma\rho})}{(C_{A0} - C_{A,1\sigma\rho})} = k_1 \cdot \frac{K_{1\sigma\rho} + 1}{K_{1\sigma\rho}} \cdot t$$

# Συνάρτηση Συγκέντρωσης -Χρόνου

## Πολύπλοκες αντιδράσεις

## Παράλληλες



$$-\frac{dC_A}{dt} = k_1 \cdot C_A + k_2 \cdot C_A = (k_1 + k_2) \cdot C_A \quad (1)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 \cdot C_A \quad (2)$$

$$\frac{dC_C}{dt} = k_2 \cdot C_A \quad (3)$$

Διαιρώ την (2) με την (1) (Για  $t=0$   $C_A=C_{A0}$ ,  $C_B=C_C=0$ )

$$\frac{dC_B}{dC_A} = -\frac{k_1}{k_1 + k_2} \Rightarrow dC_B = -\frac{k_1}{k_1 + k_2} \cdot dC_A \Rightarrow \int_{C_{B0}}^{C_B} dC_B = -\frac{k_1}{k_1 + k_2} \cdot \int_{C_{A0}}^{C_A} dC_A \Rightarrow$$

$$C_B = -\frac{k_1}{k_1 + k_2} (C_A - C_{A0}) \Rightarrow C_B = -\frac{k_1}{k_1 + k_2} \cdot C_{A0} \cdot \left( \frac{C_A}{C_{A0}} - 1 \right) = \frac{k_1}{k_1 + k_2} \cdot C_{A0} \cdot \left( 1 - \frac{C_A}{C_{A0}} \right)$$

$$C_B = \frac{k_1}{k_1 + k_2} \cdot x_t$$

Όπου  $x_t$  παριστάνεται η συνολική μετατροπή του A σε B και C

Η απόδοση του B είναι  $x_B = \frac{C_B}{C_{A0}} = \frac{k_1}{k_1 + k_2} \cdot \left( 1 - \frac{C_A}{C_{A0}} \right) = \frac{k_1}{k_1 + k_2} \cdot x_t$

Διαιρώ την (3) με την (1)

$$\frac{dC_C}{dC_A} = -\frac{k_2}{k_1 + k_2} \Rightarrow dC_B = -\frac{k_2}{k_1 + k_2} \cdot dC_A \Rightarrow \int_{C_{B0}}^{C_B} dC_C = -\frac{k_2}{k_1 + k_2} \cdot \int_{C_{A0}}^{C_A} dC_A \Rightarrow$$
$$C_C = -\frac{k_2}{k_1 + k_2} (C_A - C_{A0}) \Rightarrow C_C = -\frac{k_2}{k_1 + k_2} \cdot C_{A0} \cdot \left( \frac{C_A}{C_{A0}} - 1 \right) = \frac{k_2}{k_1 + k_2} \cdot C_{A0} \cdot \left( 1 - \frac{C_A}{C_{A0}} \right)$$

$$C_c = \frac{k_2}{k_1 + k_2} \cdot x_t$$

Η απόδοση του C είναι

$$x_C = \frac{C_C}{C_{A0}} = \frac{k_2}{k_1 + k_2} \cdot \left( 1 - \frac{C_A}{C_{A0}} \right) = \frac{k_2}{k_1 + k_2} \cdot x_t$$

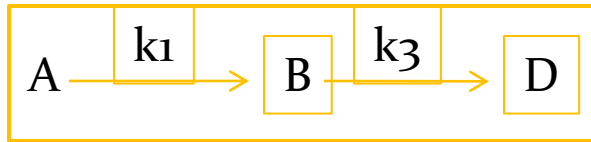
Η ολική εκλεκτικότητα του B είναι

$$x_C = \frac{x_B}{x_C} = \frac{k_1}{k_2}$$

# Συνάρτηση Συγκέντρωσης -Χρόνου

Πολύπλοκες αντιδράσεις

Επάλληλες



$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 \cdot C_A \quad (1)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 \cdot C_A - k_3 \cdot C_B \quad (2)$$

$$\frac{dC_D}{dt} = k_3 \cdot C_B \quad (3)$$

Διαιρώ την (2) με την (1)

(Για  $t=0$   $C_A=C_{A0}$ ,  $C_B=C_C=0$ )

$$\frac{dC_B}{dC_A} = -1 + \frac{k_3 \cdot C_B}{k_1 \cdot C_A}$$

$$x_B = \frac{C_B}{C_{A0}} = \frac{k_1}{k_1 - k_3} \cdot \left[ \left( \frac{C_A}{C_{A0}} \right)^{\frac{k_3}{k_1}} - \frac{C_A}{C_{A0}} \right]$$

Διαιρώ την (2) με την (1)

$$\frac{dC_D}{dC_A} = -\frac{k_3 \cdot C_B}{k_1 \cdot C_A} \quad x_D = \frac{C_D}{C_{A0}} = \frac{k_1}{k_1 - k_3} \cdot \left[ 1 - \left( \frac{C_A}{C_{A0}} \right)^{\frac{k_3}{k_1}} \right] - \frac{k_3}{k_1 - k_3} \cdot \left[ 1 - \frac{C_D}{C_{A0}} \right]$$

## Σημείωμα Ιστορικού Εκδόσεων Έργου

Το παρόν έργο αποτελεί την 1<sup>η</sup> έκδοση.

## Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών,

ΑΘΑΝΑΣΙΑ ΤΕΚΕΡΛΕΚΟΠΟΥΛΟΥ, «ΧΗΜΙΚΕΣ & ΒΙΟΧΗΜΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ». Έκδοση: 1.0.

Αγρίνιο 2015.

Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: <https://eclass.upatras.gr/courses/ENV108/index.php>

## Σημείωμα Αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά Δημιουργού, Απαγόρευση Εμπορικής Χρήσης και Όχι Παράγωγα Έργα. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων».

« Το υλικό της παρουσίασης προέρχεται από τις πανεπιστημιακές παραδόσεις του καθηγητή Δ. Καραμάνη».

