PRACOVNÍ POSTUP - WORKFLOW

Analýza problému

Bilance

Výpočet

Kontrola

Problém vždy nejprve analyzujte, nakreslete si obrázek, napište co znáte, co je úkolem, zjistěte jestli máte všechny vstupy, pomocí bilance se ujistěte, že je to řešitelné, pak přejděte k výpočtu. Jako poslední krok nezapomeňte provést kontrolu výsledků (i všech mezivýsledků).

TEPLO, TEPLOTA, TEPELNÝ TOK

Teplota [°C, K, °F] je stavová veličina, která měří průměrnou kinetickou energii pohybujících se molekul v látce, zatímco **teplo** Q [J] je dějová veličina a forma energie, která se přenáší mezi tělesy o různých teplotách, a to z teplejšího do chladnějšího. **Výkon** \dot{Q} [W = J/s] (nebo též tepelný tok) je množství tepla přenesené za jednotku času (měřené ve W). **Tepelný tok** je tedy míra rychlosti přenosu tepla, přičemž tepelný tok je přímo úměrný teplotnímu rozdílu, který je hnací silou toku. **Hustota tepelného toku** \dot{q} [W/m²] výkon vztažený na plochu. Pozor, někdy se vztahuje na délku [W/m]. **Watthodina** [Wh] je jednotka energie. V praxi se nejčastěji používá její násobek kilowatthodina, kWh (1000 watthodin) pro měření spotřeby elektřiny. **1 Wh = 3600 J**.

Entalpie H [J] - je fyzikální veličina rozměru energie

Měrná entalpie h [J/kg] – entalpie vztažená na 1 kg (počítáme jako c_p*dT – pokud není změna fáze) **Měrná tepelná kapacita** c_p [J/(kg.K)] - množství tepla potřebného k ohřátí 1 kilogramu látky o 1 teplotní stupeň (1 kelvin nebo 1 stupeň Celsia) – je závislá na teplotě

Měrné skupenské teplo varu l_v [J/kg] - teplo, které přijme 1 kilogram kapaliny, jestliže se za teploty varu celý přemění na plyn téže teploty. Naopak teplo, které odevzdá 1 kilogram plynu, pokud se celý přemění na kapalinu o téže teplotě, se nazývá měrné skupenské teplo kondenzace (též měrné skupenské teplo zkapalnění).

Parní podíl (vapor fraction) v_f – poměr hmotnosti páry k celkové hmotnosti dvoufázové (kapalinapára) směsi, vyjádřený jako desetinné číslo nebo procento. Udává, jaká část látky je v nasycené směsi v plynném stavu, a pohybuje se v rozmezí od 0 pro čistou kapalinu do 1 pro čistou páru.

 c_p (stejně jako jiné vlastnosti závisí na teplotě a tlaku) může ale pro naše výpočty uvažovat pro vodu je cca 4180 J/(kg.K), pro vzduch 1000 J/(kg.K), pro spaliny 1300 J/(kg.K). Výparné teplo vody 2257 kJ/kg.

Náklady na energii (1 hodina provozu):

LED žárovka 10W: 0,046 Kč
Notebook 65W: 0,30 Kč
Ohřev 1L vody: 0,52 Kč

Mikrovlnná trouba 800W: 3,69 KčElektrický radiátor 2000W: 9,22 Kč

Cena elektřiny a plynu se uvádí v Kč/kWh.

TEPLO, TEPLOTA, TEPELNÝ TOK

Výpočet entalpické bilance

Médium teče (m je v kg/s) dostaneme tepelný tok (např. výměník tepla)

 $\dot{Q} = \dot{m} \cdot h \ [W = I/s]$

Médium neteče (m je v kg) dostaneme potřebné teplo (např. rychlovarná konvice) $Q = m \cdot h[J]$

Ohřev kapaliny (plynu):

$$\dot{Q} = \dot{m} \cdot c_p \cdot \Delta T \ [W = J/s]$$

$$Q = m \cdot c_p \cdot \Delta T [J]$$

Odpaření syté kapaliny:

$$\dot{Q} = \dot{m} \cdot l_v \ [W = J/s]$$

$$Q=m\cdot l_v\left[J\right]$$

Částečné odpaření syté kapaliny: $\dot{Q} = \dot{m} \cdot v_f l_v \ [W = I/s]$

$$\dot{Q} = \dot{m} \cdot v_f l_v \ [W = J/s]$$

$$Q = m \cdot v_f l_v \cdot \Delta T [J]$$

Ohřev kapaliny na bod varu,

$$\dot{Q} = \dot{m} \cdot c_p \cdot \left(T_{bp} - T_{in} \right) + \dot{m} \cdot l_v + \dot{m} \cdot c_p \cdot \left(T_{out} - T_{dp} \right)$$

odpaření a přehřátí:

T_{bp} je bod varu (sytá kapalina), T_{dp} je rosný bod (sytý pára) – u čistých složek jsou si rovny, u směsí je $T_{bp} < T_{dp}$

Příkon, výkon, účinnost

 $\eta = \frac{Q}{P_0}$ P_0 – příkon [W] – na štítku přístroje P – výkon [W] – dodáno do zařízení

Spotřeba paliva

$$\dot{V_p} = \frac{\dot{Q}}{LHV} [Nm^3/s] \quad \dot{m_p} = \frac{Q}{LHV} [kg/s]$$

LHV – výhřevnost J/Nm3

LHV - výhřevnost J/kg

Příklad 1: Kolik energie je potřeba k ohřátí 1,2 l (1,2 kg) vody v rychlovarné konvici (z 20 °C na 95 °C). Její štítkový příkon je 1600 W. Jaká je potřeba teoretická doba k ohřevu? Kolik stojí ohřev, pokud cena elektřiny je 5 kč/kWh? Jaká je účinnost konvice, pokud skutečná doba ohřevu je 300 s?

Potřebné teplo (energie) - bez ztrát:

$$Q = m \cdot c_p \cdot \Delta T = 1.2 \cdot 4180 \cdot (95 - 20) = 376 \ 200 \ J$$

Teoretická doba ohřevu:

Výpočet teoretické ceny za ohřev

(1Wh = 3600 J):

(1Wh = 3600 J):

$$t_{teoretick\acute{a}} = Q/P_o = 376200/1600 = 235 s$$

 $E_{kWh} = \frac{Q}{3600} = \frac{376200}{3600} = 104,5Wh = 0,1045 kWh$

 $cena = E_{kWh} \cdot C = 0,1045 \cdot 5 = 0,52 \text{ K}$ č

Výpočet skutečného výkonu:

$$P_{u\check{z}ite\check{c}n\acute{y}} = \frac{Q}{t_{m\check{z}\check{r}en\acute{y}}} = \frac{376200}{300} = 1254 \ W$$

Účinnost rychlovarné konvice:

$$\eta = \frac{P_{u\check{z}ite\check{c}n\acute{y}}}{P_{n\check{r}ikon}} = \frac{1254}{1600} = 0.784 = 78.4 \%$$

Výpočet skutečné ceny za ohřev
$$E_{kWh} = \frac{P_{p\check{\text{r}}ikon} \cdot t_{m\check{\text{e}}\check{\text{r}}en\acute{\text{y}}}}{3600} = \frac{1600 \cdot 300}{3600} = 133,3 \ Wh = 0,1333 \ kWh$$
 (1Wh = 3600 J):

 $cena = E_{kWh} \cdot C = 0.1333 \cdot 5 = 0.67 \text{ K}$ č **Účinnost 78,4 %** znamená, že přibližně 78 % elektrické energie se skutečně přemění na teplo, které ohřeje vodu. Zbylých 21,6 % energie se ztratí do okolí:

- Ohřev samotné konvice a jejích stěn
- Úniky tepla do okolního vzduchu
- Ztráty unikající párou
- Spotřeba na zvukové a světelné projevy konvice

Jedná se o **typickou hodnotu pro běžné domácí spotřebiče** tohoto typu. Moderní kvalitní rychlovarné konvice dosahují účinnosti 75-85 %.

TEPLO, TEPLOTA, TEPELNÝ TOK

Příklad 2: Mějme plynový průtokový ohřívač vody. Jaký výkon musí mít, aby ohřál 5 l/min (cca 5 kg/min vody o ∆T = 35 °C (tj. např. z teploty 20 °C na 55 °C). Pokud má ohřívač účinnost 75 %, jaký je jeho příkon? Kolik paliva (plynu) je potřeba, pokud výhřevnost zemního plynu je 34 MJ/Nm3? Kolik stojí hodinový provoz, pokud cena zemního plynu je 2 Kč/kWh?

Výpočet výkonu:

$$\dot{Q} = \dot{m} \cdot c_n \cdot \Delta T = 5 \cdot 4160 \cdot (55 - 20) = 12133 W$$

Pozor!! Tentokráte počítáme výkon, ten je ve Wattech. Voda teče – výkon je teplo za čas.

Vypočtený výkon je zároveň užitečný příkon $P_{užitečný}$. Jen jiné pojmenování.

Příkon:

$$P_{p\check{r}ikon} = \frac{\dot{Q}}{\eta} = \frac{12133}{0.75} = 16177 W = 16.18 kW$$

Průtok zemního plynu:

$$\dot{V}_{plyn} = \frac{P_{p\check{r}ikon}}{H_v} = \frac{16177\,J/s}{34000000\,J/Nm^3} = 0.000476\frac{Nm^3}{s} = 1.71\,Nm^3/h$$

Výpočet ceny provozu za 1 hodinu:

$$cena = P_{p\check{r}ikon}[kW] \cdot doba[h] \cdot C[K\check{c}/kWh] = 16,18 \cdot 1 \cdot 2 = 32,36 \ K\check{c}/h$$

Technické posouzení: Výsledek ukazuje, že pro komfortní průtok teplé vody (5 l/min je typická hodnota pro umyvadlo nebo sprchu) je zapotřebí ohřívač se značným příkonem přibližně **16 kW**. To je běžná hodnota pro plynové průtokové ohřívače (často označované jako "karma").

Elektrické vs. plynové ohřívače: Elektrické průtokové ohřívače s takovým příkonem vyžadují silný jistič (obvykle 3×25A) a samostatný elektrický okruh. Plynové ohřívače jsou v tomto ohledu flexibilnější.

Provozní náklady: Spotřeba 1,71 Nm³ plynu za hodinu a s tím spojená cena přibližně 32 Kč ilustruje náklady na nepřetržitý provoz. Při běžném používání:

- 10 minut sprchování: ≈ 5,40 Kč
- 5 minut mytí nádobí: ≈ 2,70 Kč
- 2 minuty mytí rukou: ≈ 1,08 Kč

Úspora energie: Průtokové ohřívače jsou energeticky efektivní, protože ohřívají vodu pouze při jejím odběru, na rozdíl od zásobníkových ohřívačů, které musí udržovat teplotu i v době nečinnosti.

Příklad 3: Kolik energie je potřeba k odpaření 1,2 l (cca 1,2 kg) vody o počáteční teplotě 20 °C na přehřátou páru o teplotě 160 °C? Uvažujeme atmosférický tlak, tj. teplota bodu varu je cca 100 °C. c_p vody je 4160 J/(kg.K), c_p páry je 1100 J/(kg.K), výparné teplo vody l_v je 2257 kJ/kg.

Ohřev na bod varu: $Q_l =$

$$Q_l = m \cdot c_{p,water} \cdot (t_{bp} - t_1) = 1.2 \cdot 4160 \cdot (100 - 20) = 399360 J$$

Vypaření vody (změna fáze):

$$Q_{lv} = m \cdot v_f \cdot l_v = 1,2 \cdot 1 \cdot 2257000 = 2708400 J$$

 v_{t} je vapor fraction a je rovno 1 – dojde k odpaření veškeré vody

Přehřátí páry:

$$Q_v = m \cdot c_{p,vapor} \cdot (t_2 - t_{bp}) = 1.2 \cdot 1100 \cdot (160 - 100) = 79200 J$$

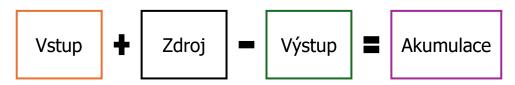
Celkové potřebné teplo:

$$Q = Q_l + Q_{lv} + Q_v = 3.19 \, MJ$$

Ohřev vody představuje 12,5 %, vypaření vody 85,0 % a ohřev páry 2,5 %.

Další podobné příklady jsou kombinací těchto příkladů – jen se mění média, místo vody může být vzduch, ocel. Jako palivo může být elektřina, plyn, uhlí, dřevo. Různá média mají různé vlastnosti. Postup výpočtu se nemění.

BILANCE



Zákon zachování energie

$$\Delta \dot{H} + \Delta \dot{E}_k + \Delta \dot{E}_p = \dot{Q} - \dot{W}_s$$

Kinetickou energie (E_k) a potenciální energii (E_p) nebudeme uvažovat, nebudeme uvažovat ani práci systému (W_s) . Budeme řešit pouze entalpickou bilanci (H) (jednotky, které budeme řešit do umožňují) – tj. systém budeme jen ohřívat a ochlazovat – dodávat nebo odebírat teplo (Q).

Hmotnostní bilance – co vstoupí do vystoupí (v ustáleném stavu)

Hranice systému



Platí pro libovolnou extensivní veličinu (hmotnost, vnitřní energii, látku,...)

Vstupy: přichází dovnitř přes hranice systému

Zdroj : tvorba (spotřeba) uvnitř systému Výstup: odchází ven přes hranice systému

Akumulace: růst (pokles) bilancované veličiny uvnitř

systému

Aplikace vyžaduje definovat:

Co bilancujeme (jakou veličinu + jaké **složky**) Jaký systém bilancujeme (hranice bilancovaného systému)

Časový úsek, pro který bilanci stanovujeme

Obecný postup při bilancování

Klasifikace bilance

- Podle počtu složek
 - Jednosložková
 - Vícesložková
- Bez chemické reakce s chemickou reakcí
- Bez recyklu s recyklem
- Bez a s výměnnou tepla (izolovaný systém)
- V ustáleném stavu nebo s akumulací hmoty

Různé typy úloh a jejich kombinací vedou na různou složitost řešeného problému (postup řešení, matematický aparát, vstupní data)

- 1. Nakreslit bilanční schéma, označit uzly, proudy a složky
- 2. Zapsat souhrn předpokladů
- 3. (Pro systémy s reakcemi: Určení stechiometrických koeficientů chemických reakcí)
- Zapsat složení všech proudů (složky, skupiny složek)
- 5. Zvolit bilancované veličiny (hmotnost, mol. množství, energie, ...)
- 6. Matematický zápis všech známých vztahů mezi veličinami (především bilanční a stavové rovnice)
- 7. Přepočet vstupních dat a vztahů na jednotný základ bilancování
- 8. Řešení (eliminační postup, sekvenční postup, soustava rovnic)
- 9. Kompletní výpis tabulku proudů
- 10. Kontrola správnosti výpočtu (autokorekce)

Bilanční rovnice (obecné)

- · Několik proudů vstupuje a několik proudů vystupuje
- Hmotnostní bilance: $\sum_{vstupy} \dot{m_i} = \sum_{v\acute{y}stupy} \dot{m_j}$
- Bilance složek: $\sum_{vstupy} \dot{m}_{A,i} = \sum_{v ext{y} ext{stupy}} \dot{m}_{A,j} = \sum_{v ext{stupy}} \dot{n}_{A,i} = \sum_{v ext{stupy}} \dot{n}_{A,i}$

pro $\forall A \in \{\text{komponenty} - nap^* . CH_4, O_2, H_2O\}$

- Energetická bilance: $\sum_{vstupy} \dot{m}_{A,i} \ h_i = \sum_{vstupy} \dot{m}_{A,j} \ h_j$
- Pomocné vztahy součty hmotnostních, objemových, molárních zlomků:

 $\sum_{komponenty} w_A = 1$ pro všechny proudy

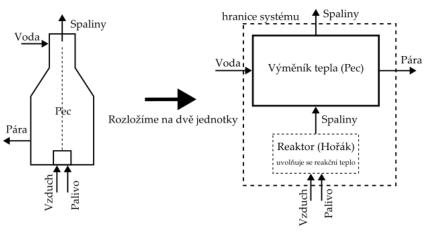
Veličiny popisující látkové složení

- $\begin{array}{lll} \bullet & \text{Hmotnostní zlomky} & (w_i = m_i/m_{tot}) \\ \bullet & \text{Molární zlomky} & (x_i = n_i/n_{tot}) \\ \bullet & \text{Objemové zlomky} & (\varPhi_i = V_i/\sum V_j) \\ \bullet & \text{Parciální tlaky} & (p = \sum p_i) \end{array}$
- Koncentrace
 - Hmotnostní (ρ_i = m_i/V)
 Molární (c_i = n_i/V)
 Objemová (Φ_i = V_i/V_{tot}), totožná s objemovými zlomky pouze v ideálních směsích, kde objem složek je aditivní

Chemické reakce je výhodné (nutné) řešit v molech (molové průtoky). Opět platí rovnice hmotnostní bilance. Co vstupuje, to vystupuje. Teplo vzniklé nebo absorbované reakcí budeme počítat v jiné části – teď ho nebudeme uvažovat.

Rozložení složitého procesu na základní jednotky

Složitý proces rozložíme na jednodušší procesy.



Nejprve provedeme bilanci systému, tzn. vstup do systému = výstup ze systému

Poté můžeme bilancovat jednotlivá zařízení

Složité

Toto už jednoduše vyřešíme

Co když máme chemickou reakci

Mějme stechiometrickou rovnici

$$\underbrace{aA + bB}_{reaktanty} \rightarrow \underbrace{cC + dD}_{produkty}$$

Než se pustíme do bilancování, musíme si ujasnit několik základních pojmů. Představte si chemickou reakci jako kuchařský recept.

Stechiometrická rovnice je náš "recept". Říká nám, že aby zreagovalo *a* molů složky *A*, tak potřebujeme *b* molů složky *B* a dostaneme *c* molů složky *C* a *d* molů složky *D*.

Například rovnice
$$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$$

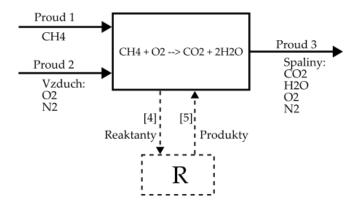
říká, že na reakci jednoho molu metanu potřebujeme dva moly kyslíku a dostaneme jeden mol oxidu uhličitého a dva moly vody (vodní páry).

Toto je ale ideální (školní) případ. V reálném procesu může nastat, že ne všechna složka A zreaguje (má nějaký stupeň konverze) a velmi často je složka B v přebytku. To nám popisují následující vlastnosti:

Stupeň konverze (α): Udává, jaká část (v %) jednoho z reaktantů (většinou klíčové složky) skutečně zreagovala. Konverze 100 % znamená, že všechen tento reaktant se spotřeboval. Konverze 80 % znamená, že 20 % tohoto reaktantu zbylo a odchází z reaktoru spolu s produkty. **Přebytek složky (λ):** V praxi často dáváme jednoho reaktantu více, než je podle "receptu" potřeba, abychom měli jistotu, že ten druhý (dražší nebo důležitější) zreaguje co nejvíce. Přebytek 20 % vzduchu znamená, že jsme ho dodali o 20 % více, než je stechiometricky nutné.

$$\lambda = \frac{skutečný přívod - stechiometrická spotřeba}{stechiometrická spotřeba}$$

Reakce probíhají v zařízení nazývaném reaktor. Vstupuje do něho 1 nebo více proudů (Např. CH4 a vzduch (21 % obj. O2 a 79 % obj. N2) a vstupují z něj opět jeden nebo více proudů (složení záleží na reakce, stupni konverzi a přebytku složek). Pro lepší názornost a výpočty se zavádí fiktivní proudy (v obrázku čárkovaně), které popisují stechiometrickou reakci – Reaktanty zanikají, proto šipka směřuje ze systému ve. Produkty vznikají, proto šipka směřuje do systému.



Chemické reakce je výhodné (nutné) řešit v molech (molové průtoky).

Opět platí rovnice hmotnostní bilance. Co vstupuje, to vystupuje.

Teplo vzniklé nebo absorbované reakcí budeme počítat v jiné části – teď ho nebudeme uvažovat.

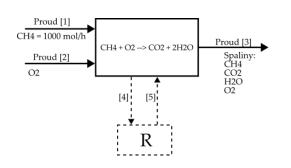
Příklad 1: Spalujeme 16 kg/h metanu (CH_4) s přesně stechiometrickým množstvím kyslíku (O_2) – přebytek kyslíku je 0 %. Konverze metanu je 100 %. Jaké je složení výstupního proudu?

Reakce:

$$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$$

Molární hmotnosti: $M(CH_4) = 16 \text{ g/mol}$, $M(O_2) = 32 \text{ g/mol}$, $M(CO_2) = 44 \text{ g/mol}$, $M(H_2O) = 18 \text{ g/mol}$.

Výpočet



Přepočet na mol

$$n_{CH_4,1} = \frac{16000 \text{ g/h}}{16 \text{ g/mol}} = 1000 \text{ mol/h}$$

V proudu (1) už jiná složka není – ostatní jsou nulové.

Podle stech. rovnice potřebujeme 2x více molů O₂:

$$n_{O_2,2} = 2 \cdot n_{CH_4,1} = 2 \cdot 1000 = 2000 \ mol/h$$

V proudu (2) už jiná složka není – ostatní jsou nulové.

Podle stechiometrické rovnice víme, že reakce (proud (4)) se účastní 1000 mol/h CH4 a 2000 mol/h O2. Tyto složky jsou v proudu (3).

$$n_{CH_{4,3}} = konverze \cdot n_{CH_{4,1}} = 1 \cdot 1000 = 1000 \ mol/h$$

$$n_{O_2,3} = 2 \cdot n_{CH_4,3} = 2 \cdot 1000 = 2000 \ mol/h$$

V proudu (3) už jiná složka není – ostatní jsou nulové.

Podle stech. rovnice víme, že vzniká (proud (5)) CO_2 a H_2O v poměru 1:1 a 1:2 vůči CH_4 .

$$n_{CO_2,4} = 1 \cdot n_{CH_4,3} = 1 \cdot 1000 = 1000 \ mol/h$$

$$n_{H_2O,4} = 2 \cdot n_{CH_4,3} = 2 \cdot 1000 = 2000 \ mol/h$$

V proudu (4) už jiná složka není – ostatní jsou nulové.

Proud [1] CH4 = 1000 mol/h Proud [2] O2 = 2000 mol/h CH4 + O2 --> CO2 + 2H2O Spaliny: CH4 = 0 mol/h CO2 = 1000 mol/h H2O = 2000 mol/h O2 = 0 mol/h O2 = 0 mol/h CO2 = 1000 mol/h H2O = 2000 mol/h CO2 = 1000 mol/h H2O = 2000 mol/h R R

 $n_{H_2O,3} = 2000 \ mol/h$

Bilance: VSTUP = VÝSTUP.

$$\begin{aligned} &n_{CH_4,1} + n_{CH_4,2} + n_{CH_4,5} = n_{CH_4,3} + n_{CH_4,4} & 1000 + 0 + 0 = n_{CH_4,3} + 1000 \\ &n_{O_2,1} + n_{O_2,2} + n_{O_2,5} = n_{O_2,3} + n_{O_2,4} & 0 + 2000 + 0 = n_{O_2,3} + 2000 \\ &n_{CO_2,1} + n_{CO_2,2} + n_{CO_2,5} = n_{CO_2,3} + n_{CO_2,4} & 0 + 0 + 1000 = n_{CO_2,3} + 000 \\ &n_{H_2O,1} + n_{H_2O,2} + n_{H_2O,5} = n_{H_2O,3} + n_{H_2O,4} & 0 + 0 + 2000 = n_{H_2O,3} + 0000 \end{aligned}$$

	1	2	3	4	5
CH4	1000	0	0	1000	0
O2	0	2000	0	2000	0
CO2	0	0	1000	0	1000
H2O	0	0	2000	0	2000
Suma	1000	2000	3000	3000	3000

$\mathrm{n}_{CH_4,3}=0\ mol/h$
$\mathbf{n}_{O_2,3} = 0 mol/h$
$\mathrm{n}_{CO_2,3}=1000\ mol/h$

	1	2	3	4	5
CH4	16	0	0	16	0
O2	0	64	0	64	0
CO2	0	0	44	0	44
H2O	0	0	36	0	36
Suma	16	64	80	80	80

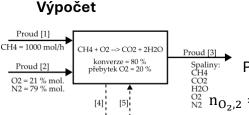
Hmotnostní průtoky [kg/h] – **VSTUP = VÝSTUP**

Příklad 2: Spalujeme 16 kg/h metanu (CH_4) s přesně stechiometrickým množstvím kyslíku (O_2) – přebytek kyslíku je 20 %. Konverze metanu je 80 %. Místo čistého kyslíku použijeme vzduch (21 % mol. O_2 , 79 % mol. N_2). Jaké je složení výstupního proudu?

Reakce:

$$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$$

Molární hmotnosti: $M(CH_4) = 16 \text{ g/mol}, M(O_2) = 32 \text{ g/mol}, M(CO_2) = 44 \text{ g/mol}, M(H_2O) = 18 \text{ g/mol}.$



Přepočet na mol

$$n_{\text{CH}_4,1} = \frac{16000 \text{ g/h}}{16 \text{ g/mol}} = 1000 \text{ mol/h}$$

Podle stech. rovnice potřebujeme 2x více molů O₂ + 20% přebytek:

 $n_{\text{N2}} = 1000 \cdot (1 + 0.2) = 2 \cdot n_{\text{CH}_4,1} \cdot (1 + p \cdot ebytek) = 2 \cdot 1000 \cdot (1 + 0.2) = 2400 \, mol/h$

 $n_{N_2,2} = \frac{79}{21} \cdot n_{O_2,2} = \frac{79}{21} \cdot 2400 \approx 9029 \ mol/h$ Dusík je "balast" - nereaguje

Podle stechiometrické rovnice víme, že reakce (proud (4)) se účastní jen 80 % množství CH4 a O2, tj. 800 mol/h CH4 a 1600 mol/h O2. Tyto složky jsou v proudu (3).

$$n_{CH_4,3} = konverze \cdot n_{CH_4,1} = 0.8 \cdot 1000 = 800 \ mol/h$$

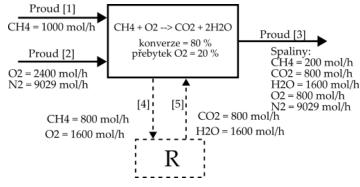
$$\rm n_{O_2,3} = 2 \cdot n_{CH_4,3} = 2 \cdot 800 = 1600 \ mol/h$$

Podle stech. rovnice víme, že vzniká (proud (5)) CO_2 a H_2O v poměru 1:1 a 1:2 vůči CH_4 .

$$n_{CO_2,4} = 1 \cdot n_{CH_4,3} = 1 \cdot 800 = 800 \ mol/h$$

$$n_{H_2O,4} = 2 \cdot n_{CH_4,3} = 2 \cdot 800 = 1600 \ mol/h$$

Bilance: VSTUP = VÝSTUP.



$$n_{CH_4,1} + n_{CH_4,2} + n_{CH_4,5} = n_{CH_4,3} + n_{CH_4,4}$$

$$\Pi_{CH_4,1} + \Pi_{CH_4,2} + \Pi_{CH_4,5} = \Pi_{CH_4,3} + \Pi_{CH_4,5}$$

$$n_{O_2,1} + n_{O_2,2} + n_{O_2,5} = n_{O_2,3} + n_{O_2,4}$$

$$\mathbf{n}_{N_2,1} + \mathbf{n}_{N_2,2} + \mathbf{n}_{N_2,5} = \mathbf{n}_{N_2,3} + \mathbf{n}_{N_2,4}$$

$$n_{CO_2,1} + n_{CO_2,2} + n_{CO_2,5} = n_{CO_2,3} + n_{CO_2,4}$$

$$n_{H_2O,1} + n_{H_2O,2} + n_{H_2O,5} = n_{H_2O,3} + n_{H_2O,4}$$

$$1000 + 0 + 0 = n_{CH_4,3} + 800$$

$$0 + 2400 + 0 = n_{O_2,3} + 1600$$

$$0 + 9029 + 0 = n_{N_2,3} + 0$$

$$0 + 3023 + 0 = 11_{N_2,3} + 0$$

$$0 + 0 + 800 = n_{CO_2,3} + 0$$

$$0 + 0 + 1600 = n_{H_2O,3} + 0$$

$$n_{CH_4,3} = 200 \ mol/h$$

$${\rm n}_{O_2,3} = 800 \ mol/h$$

$$n_{N_2,3} = 9029 \ mol/h$$

$$n_{CO_2,3} = 800 \ mol/h$$

$$n_{H_2O,3} = 1600 \ mol/h$$

	1	2	3	4	5
CH4	1000	0	200	800	0
O2	0	2400	800	1600	0
N2	0	9029	9029	0	0
CO2	0	0	800	0	800
H2O	0	0	1600	0	1600
Suma	1000	11429	12429	2400	2400

	1	2	3	4	5
CH4	16	0	3,2	12,8	0
02	0	76,8	25,6	51,2	0
N2	0	252,81	252,81	0	0
CO2	0	0	35,2	0	35,2
H2O	0	0	28,8	0	28,8
Suma	16	329,6	345,6	64	64

REAKČNÍ ENTALPIE

Reakční entalpie (ΔH) nám říká, kolik energie (tepla) se spotřebuje, nebo naopak uvolní, když z reaktantů vytvoříme produkt. Pokud se teplo uvolňuje, reakční entalpie je záporná, je reakce exotermická. Pokud se teplo spotřebovává, musíme energii dodat, entalpie má kladné znaménko a reakci říkáme endotermická.

Výpočet reakční entalpie

Tady se opíráme o geniálně jednoduchý **Hessův zákon**. Ten říká: "Je úplně jedno, jak složitou cestou se z reaktantů stanou produkty. Celková energetická změna bude vždycky stejná.,

Představte si to jako výlet na Sněžku. Je jedno, jestli jdete přímo nahoru, nebo oklikou přes pět dalších kopců. Výškový rozdíl mezi startem a cílem bude pořád stejný. Díky tomu můžeme spočítat i entalpii u reakcí, které v praxi probíhají složitě nebo je nelze změřit.

Výpočet pomocí slučovací entalpie

Standardní slučovací entalpie (ΔHsluc °0) je energie, která se spotřebuje/uvolní při vzniku **jednoho molu** sloučeniny z jejích **prvků** v nejstabilnější podobě (např. kyslík jako O₂, uhlík jako grafit). Tyto hodnoty najdeme v chemických tabulkách.

Zlaté pravidlo: Slučovací entalpie **prvků** (jako O2, H2, N2, Fe, C) je **vždy nula**. Je to náš výchozí bod, naše "nadmořská výška nula".

$$\Delta H_{298}^0 = \sum_{produkty} \nu_p \left(\Delta H_{slu\check{c},298}^0 \right)_p - \sum_{reaktanty} \nu_r \left(\Delta H_{slu\check{c},298}^0 \right)_p \qquad \text{v je stechiometric dané látky v ro$$

v je stechiometrický koeficient dané látky v rovnici.

Příklad 1: Spalování propanu v grilu

Chceme zjistit, kolik tepla uvolní spálení propanu.

$$C_3H_8(g)+5O_2(g)\rightarrow 3CO_2(g)+4H_2O(g)$$

Hodnoty z tabulek (v kJ/mol)

$$C3H8(g) = -103.8$$
 $O2(g) = 0$ $CO2(g) = -393.5$ $H2O(l) = -241.8$

$$\Delta H^0_{298} = (3 \cdot (-393,5) + 4 \cdot (-241,8)) - (1 \cdot (-103,8) + 5 \cdot 0) = -2043,9 \, kJ/mol$$

Závěr: Při spálení jednoho molu propanu (cca 44 gramů) se uvolní obrovské množství tepla, 2043,9 kJ. Znaménko mínus potvrzuje, že reakce je silně **exotermická** – proto na tom můžeme grilovat.

Jakou teplotu mají spaliny? Na jakou teplotu ohřejeme 2 l vody z 15 °C, když spálíme 2 g propanu?

Výpočet pomocí spalných entalpií

Tato metoda se používá hlavně u organických sloučenin. Využívá **standardní spalné entalpie** (ΔHspal,2980), což je teplo, které se uvolní při dokonalém spálení jednoho molu látky na konečné oxidační produkty (např. CO2(g),H2O(l)) za standardních podmínek.

Princip: Na rozdíl od slučovacích entalpií se reakční teplo vypočítá jako rozdíl sumy spalných entalpií reaktantů a sumy spalných entalpií produktů.

Důležité pravidlo: Spalná entalpie konečných produktů spalování (např. CO2,H2O) je nulová.

$$\Delta H_{298}^0 = \sum_{reaktanty} \nu_p \left(\Delta H_{spal,298}^0 \right)_p - \sum_{produkty} \nu_r \left(\Delta H_{spal,298}^0 \right)_p$$

REAKČNÍ ENTALPIE (pokračování)

Název sloučeniny	Vzorec	Stav	ΔH _{sluč} ⁰ (kJ/mol)	ΔH _{spal} ⁰ (kJ/mol)	Poznámka
Anorganické sloučeniny					
Voda	H2O	(l)	-285,8	0	Produkt spalování
Voda (plyn)	H2O	(g)	-241,8	0	Produkt spalování
Oxid uhličitý	CO2	(g)	-393,5	0	Produkt spalování
Oxid uhelnatý	CO	(g)	-110,5	-283	
Amoniak (čpavek)	NH3	(g)	-46,1	-382,6	
Kyselina sírová	H2SO4	(l)	-814	N/A	
Oxid siřičitý	SO2	(g)	-296,8	N/A	
Chlorovodík	HCl	(g)	-92,3	N/A	
Uhličitan vápenatý	CaCO3	(s)	-1206,9	N/A	
Oxid vápenatý	CaO	(s)	-635,1	N/A	
Základní uhlovodíky (alkany)					
Methan	CH4	(g)	-74,8	-890,4	Hlavní složka zem. plynu
Ethan	C2H6	(g)	-84,7	-1560,7	
Propan	C3H8	(g)	-103,8	-2219,9	Propan-butan
Butan	C4H10	(g)	-125,6	-2877,5	Propan-butan
Oktan	C8H18	(l)	-249,9	-5470,5	Složka benzínu
Nenasycené Juhlovodíky					
Ethen (Ethylen)	C2H4	(g)	+52,3	-1411,2	
Ethyn (Acetylen)	C2H2	(g)	+226,7	-1301,1	Používá se ke sváření
Benzen	C6H6	(l)	+49,0	-3267,6	Aromatický uhlovodík
Alkoholy a karboxylov kyseliny	ré				
Methanol	СНЗОН	(l)	-238,6	-726,1	
Ethanol (Líh)	C2H5OH	(l)	-277,7	-1366,8	
Kyselina mravenčí	НСООН	(l)	-424,7	-254,4	
Kyselina octová	СНЗСООН	(l)	-484,3	-874,5	
Sacharidy					
Glukóza	C6H12O6	(s)	-1274,4	-2805	Základní cukr