

Označenie zložiek a prúdov:

zložka $i = A, B, C, \dots, K$
 prúd $j = 1, 2, 3, \dots, M, \dots, N$
 reakcia $l = 1, 2, 3, \dots, L$

Bilancia látkového množstva:

v systéme bez chemickej reakcie

$$\sum_{j=1}^M n_j = \sum_{j=M+1}^N n_j$$

v systéme s chemickou(ými) reakciou(ami)

$$\sum_{j=1}^M n_j + \sum_{l=1}^L n_{z,l} = \sum_{j=M+1}^N n_j$$

bilancia zložky i v prúde (zmesi) j

$$n_{ji} = n_j x_{ji}$$

Mólový zlomok zložky i v prúde (zmesi) j :

$$x_{ji} = \frac{n_{ji}}{n_j}$$

väzbové pravidlo (sumačný vzťah)

$$\sum_{i=A}^K x_{ji} = x_{jA} + x_{jB} + \dots + x_{jK} = 1$$

Bilancia hmotnosti:

celková bilancia

$$\sum_{j=1}^M m_j = \sum_{j=M+1}^N m_j$$

bilancia zložky i v prúde (zmesi) j

$$m_{ji} = m_j w_{ji}$$

bilancia v systéme s akumuláciou:

celková bilancia

$$\sum_{j=1}^M m_j = \sum_{j=M+1}^N m_j + m_a$$

bilancia pre zložku i

$$\sum_{j=1}^M m_j w_{ji} = \sum_{j=M+1}^N m_j w_{ji} + m_{ai}$$

Hmotnostný zlomok zložky i v prúde (zmesi) j :

$$w_{ji} = \frac{m_{ji}}{m_j}$$

väzbové pravidlo (sumačný vzťah)

$$\sum_{i=A}^K w_{ji} = w_{jA} + w_{jB} + \dots + w_{jK} = 1$$

Mólová hmotnosť prúdu (zmesi) j

$$M_j = \frac{m_j}{n_j}$$

vyjadrenie pomocou mólových zlomkov zložiek zmesi i

$$M_j = \sum_{i=A}^K M_i x_{ji} = M_A x_{jA} + M_B x_{jB} + \dots + M_K x_{jK}$$

vyjadrenie pomocou hmotnostných zlomkov zložiek zmesi i

$$M_j = \frac{1}{\sum_{i=A}^K \frac{w_{ji}}{M_i}} = \frac{1}{\frac{w_{jA}}{M_A} + \frac{w_{jB}}{M_B} + \dots + \frac{w_{jK}}{M_K}}$$

Prepočtové vzťahy medzi mólovými a hmotnostnými zlomkami zložiek i v prúde (zmesi) j :

$$x_{ji} = \frac{\frac{w_{ji}}{M_i}}{\sum_{i=1}^K \frac{w_{ji}}{M_i}} \Rightarrow x_{jA} = \frac{\frac{w_{jA}}{M_A}}{\frac{w_{jA}}{M_A} + \frac{w_{jB}}{M_B} + \dots + \frac{w_{jK}}{M_K}}$$

$$w_{ji} = \frac{x_{ji} M_i}{\sum_{i=1}^K x_{ji} M_i} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow w_{jA} = \frac{x_{jA} M_A}{x_{jA} M_A + x_{jB} M_B + \dots + x_{jK} M_K}$$

Výt'azok zložky i pri delení zmesi látok:

$$Y_i = \frac{m_{pi}}{m_{si}} = \frac{n_{pi}}{n_{si}}$$

p – produkt, s – surovina

Stavová rovnica ideálneho plynu,

Daltonov a Amagatov zákon:

$$PV = nRT, P = \sum_i P_i, V = \sum_i V_i$$

Hustota ideálnej plynnej zmesi j :

$$\rho_j = \frac{PM_j}{RT}$$

Hustota kvapalnej a tuhej zmesi j :

$$\rho_j = \frac{1}{\sum_{i=A}^K \frac{w_{ji}}{\rho_i}} = \frac{1}{\frac{w_{jA}}{\rho_A} + \frac{w_{jB}}{\rho_B} + \dots + \frac{w_{jK}}{\rho_K}}$$

Mólová koncentrácia zložky i v prúde (zmesi) j :

$$c_{ji} = \frac{n_{ji}}{V_j} = \frac{\frac{m_{ji}}{M_i}}{\frac{m_j}{\rho_j}} = \frac{m_{ji}\rho_j}{m_j M_i} = \frac{w_{ji}\rho_j}{M_i}$$

Hmotnostná koncentrácia zložky i v prúde (zmesi) j :

$$\bar{c}_{ji} = \frac{m_{ji}}{V_j} = \frac{m_{ji}}{\frac{m_j}{\rho_j}} = w_{ji}\rho_j$$

Relatívny mólový zlomok zložky i v zmesi j :

$$X_{ji} = \frac{n_{ji}}{n_{j,sz}}$$

sz – spojovacia zložka v danej zmesi

väzbové pravidlo neplatí, t. j. $\sum_{i=A}^K X_{ji} \neq 1$

Relatívny hmotnostný zlomok zložky i v zmesi j :

$$W_{ji} = \frac{m_{ji}}{m_{j,sz}}$$

sz – spojovacia zložka v danej zmesi

väzbové pravidlo neplatí, t. j. $\sum_{i=A}^K W_{ji} \neq 1$

Rozsah resp. rýchlosť chemickej reakcie:

$$\xi = \frac{n_{zi}}{\nu_i} = \frac{n_{i,výstup} - n_{i,vstup}}{\nu_i}, \quad n_{zi} = \frac{m_{zi}}{M_i}$$

Stupeň premeny reaktanta i , $\alpha_i \in \langle 0; 1 \rangle$:

$$\alpha_i = \frac{-n_{zi}}{n_{i,vstup}} = \frac{n_{i,vstup} - n_{i,výstup}}{n_{i,vstup}}$$

$$\alpha_i = \frac{-m_{zi}}{m_{i,vstup}} = \frac{m_{i,vstup} - m_{i,výstup}}{m_{i,vstup}}$$

Prepočet medzi rozsahom reakcie a stupňom premeny (reaktant i):

$$\xi = \frac{-\alpha_i n_{i,vstup}}{\nu_i} = \frac{-\alpha_i m_{i,vstup}}{\nu_i M_i}$$

Teoretický rozsah resp. teoretická rýchlosť chemickej reakcie:

$$\xi^T = \frac{-n_{k,vstup}}{\nu_k} = \frac{-1}{\nu_k} \frac{m_{k,vstup}}{M_k}$$

k – je limitujúci (kľúčový) reaktant

Koeficient nadbytku reaktanta i :

$$KN_i = \frac{n_{i,vstup}}{n_i^T} = \frac{m_{i,vstup}}{m_i^T}$$

Zoznam symbolov

c	mólová koncentrácia
\bar{c}	hmotnostná koncentrácia
KN	koeficient nadbytku
M	mólová hmotnosť
m	hmotnosť
n	látkové množstvo
P	tlak
R	mólová plynová konštanta
T	termodynamická teplota
V	objem
W	relatívny hmotnostný zlomok
w	hmotnostný zlomok
X	relatívny mólový zlomok
x	mólový zlomok
Y	výtlačok
α	stupeň premeny (konverzia)
ν	stechiometrický koeficient
ξ	rozsah (rýchlosť) reakcie
ρ	hustota

Indexy

A, B, C, ..., K	zložky
i	zložka
j	prúd (zmes)
k	limitujúci (kľúčový) reaktant
p	produkt
s	surovina
sz	spojovacia zložka
T	teoretický
z	zdroj zložky
vstup	vstup zložky
výstup	výstup zložky
1, 2, 3, ..., M, ..., N	prúdy
1, 2, 3, ..., L	reakcie