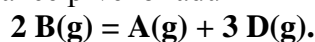


### Úloha 1-32 Aktivační energie a předexponenciální faktor

V systému ideálních plynů probíhá reakce prvního řádu



Při teplotě 800 K zreaguje za 60 minut 60 % původně přítomné složky B. Při teplotě 750 K bylo po 25 minutách zjištěno, že reakční směs obsahuje 10 mol.% složky A. Vypočítejte

- (a) aktivační energii uvažované reakce za předpokladu, že je v daném teplotním intervalu konstantní,  
(b) předexponenciální faktor Arrheniovy rovnice. Počáteční koncentrace složky B je  $0,5 \text{ mol dm}^{-3}$ .

$$[(a) E^* = 28235,2 \text{ J mol}^{-1}; (b) A = 0,5327 \text{ min}^{-1}]$$

#### Řešení

$$\text{Balance: } c_B = c_{B0} - 2x, \quad dc_B = -2 dx$$

$$c_A = x$$

$$c_D = 3x$$

$$\Sigma c = c_{B0} + 2x$$

$$c_{B0} = 0,5 \text{ mol dm}^{-3}$$

$$\frac{dc_B}{(-2) d\tau} = k_c \cdot c_B, \quad \frac{-2 dx}{(-2) d\tau} = k_c \cdot (c_{B0} - 2x)$$

$$\frac{dx}{(c_{B0} - 2x)} = k_c \cdot d\tau$$

$$\frac{1}{(-2)} \cdot \ln \frac{c_{B0} - 2x}{c_{B0}} = k_c \cdot \tau$$

$$\ln \frac{c_{B0}}{c_B} = 2 \cdot k_c \cdot \tau$$

$$T_1 = 800 \text{ K}$$

$$\tau_1 = 60 \text{ min}, \quad c_{B0} - c_B = 2x = 0,6 c_{B0} \Rightarrow c_B = 0,4 c_{B0}$$

$$k_{c1} = \frac{1}{2\tau_1} \cdot \ln \frac{c_{B0}}{c_B} = \frac{1}{2 \cdot 60} \cdot \ln \frac{c_{B0}}{0,4 c_{B0}} = \frac{-\ln 0,4}{120} = 7,63576 \cdot 10^{-3} \text{ min}^{-1}$$

$$T_2 = 750 \text{ K}$$

$$\tau_2 = 25 \text{ min}, \quad \frac{c_A}{\Sigma c} = \frac{x}{c_{B0} + 2x} = 0,1 \text{ (10 mol. \% A)}$$

$$10x = c_{B0} + 2x = 0,5 + 2x \Rightarrow x = \frac{0,5}{8}$$

$$k_{c2} = \frac{1}{2\tau_2} \cdot \ln \frac{c_{B0}}{c_{B2}} = \frac{1}{2 \cdot 25} \cdot \ln \frac{0,5}{0,5 - 2 \cdot \frac{0,5}{8}} = \frac{-\ln 0,75}{50} = 5,75364 \cdot 10^{-3} \text{ min}^{-1}$$

$$E^* = \frac{R \cdot \ln(k_{c2}/k_{c1})}{\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}} = \frac{8,314 \cdot \ln \frac{(-\ln 0,75/50)}{(-\ln 0,4/120)}}{\frac{1}{800} - \frac{1}{750}}$$

$$E^* = 28235,24 \text{ J mol}^{-1}$$

$$(b) A = k_{c1} \cdot \exp\left(+\frac{E^*}{RT_1}\right) = 7,63576 \cdot 10^{-3} \cdot \exp\left(\frac{28235,2}{8,314 \cdot 800}\right) = 0,5327 \text{ min}^{-1}$$