

Úloha 1-14 Přepočet rychlostních konstant

Pro reakci třetího řádu $2 \text{ NO(g)} + \text{O}_2\text{(g)} = 2 \text{ NO}_2\text{(g)}$, probíhající v plynné fázi při teplotě 30°C a konstantním objemu má rychlostní konstanta pro rychlostní rovnici

$$-\frac{dp_{\text{O}_2}}{d\tau} = k_{p(\text{O}_2)} \cdot p_{\text{NO}}^2 \cdot p_{\text{O}_2}$$

hodnotu $k_{p(\text{O}_2)} = 2,1 \cdot 10^{-3} \text{ kPa}^{-2} \text{ s}^{-1}$. Za předpokladu ideálního chování plynné fáze zjistíte hodnotu rychlostní konstanty (s rozměrem $\text{m}^6 \text{ mol}^{-2} \text{ s}^{-1}$) pro rychlostní rovnici, která vyjadřuje rychlost změny koncentrace NO_2 :

$$\frac{dc_{\text{NO}_2}}{d\tau} = k_{c(\text{NO}_2)} \cdot c_{\text{NO}}^2 \cdot c_{\text{O}_2}$$

$$[k_{p(\text{NO}_2)} = 2,668 \cdot 10^{-2} \text{ m}^6 \text{ mol}^{-2} \text{ s}^{-1}]$$

Řešení:

$$k_{p(\text{O}_2)} = 2,1 \cdot 10^{-3} \text{ kPa}^{-2} \text{ s}^{-1} = 2,1 \cdot 10^{-3} (10^3 \text{ Pa})^{-2} \text{ s}^{-1} = 2,1 \cdot 10^{-9} \text{ Pa}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

Za předpokladu ideálního chování plynné fáze: $p_i = c_i \cdot RT$, $dp_i = dc_i \cdot RT$

$$p_{\text{O}_2} = c_{\text{O}_2} \cdot RT, \quad p_{\text{NO}} = c_{\text{NO}} \cdot RT$$

$$\frac{dp_{\text{O}_2}}{v_{\text{O}_2}} = \frac{dp_{\text{NO}_2}}{v_{\text{NO}_2}}, \quad \frac{dp_{\text{O}_2}}{-1} = \frac{dp_{\text{NO}_2}}{+2} = \frac{dc_{\text{NO}_2} \cdot RT}{+2}$$

$$\text{rov. [1]: } \frac{dc_{\text{NO}_2} \cdot RT}{+2 d\tau} = k_{p(\text{O}_2)} \cdot (c_{\text{NO}} \cdot RT)^2 \cdot (c_{\text{O}_2} \cdot RT)$$

\Downarrow

$$\left. \begin{array}{l} \frac{dc_{\text{NO}_2}}{d\tau} = 2 k_{p(\text{O}_2)} \cdot c_{\text{NO}}^2 \cdot c_{\text{O}_2} \cdot (RT)^2 \\ \text{rov. [2]: } \frac{dc_{\text{NO}_2}}{d\tau} = k_{c(\text{NO}_2)} \cdot c_{\text{NO}}^2 \cdot c_{\text{O}_2} \end{array} \right\} k_{c(\text{NO}_2)} = 2 k_{p(\text{O}_2)} \cdot (RT)^2$$

$$k_{c(\text{NO}_2)} = 2 \cdot 2,1 \cdot 10^{-9} \cdot (8,314 \cdot 303,15)^2 = 2,668 \cdot 10^{-2} \text{ m}^6 \text{ mol}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$\left[(\text{Pa}^{-2} \text{ s}^{-1}) \cdot \left(\underbrace{\frac{\text{J}}{\text{Pa m}^3}}_{\text{K}^{-1} \text{ mol}^{-1}} \right)^2 \cdot \text{K}^2 = \text{m}^6 \text{ mol}^{-2} \text{ s}^{-1} \right]$$