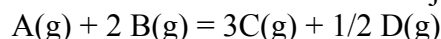


Úloha 1-15 Reakční rychlost a složení reakční směsi

V systému ideálních plynů probíhá v reaktoru o konstantním objemu jednosměrná reakce



která je celkem druhého řádu (prvého vzhledem k A a prvního vzhledem k B). V okamžiku, kdy koncentrace složky B klesá rychlostí $8 \cdot 10^{-5} \text{ mol dm}^{-3} \text{ s}^{-1}$, mají okamžité koncentrace látek A a B hodnoty $c_A = 6 \text{ mol m}^{-3}$ a $c_B = 8 \cdot 10^{-6} \text{ mol cm}^{-3}$. Vypočítejte složení reakční směsi (v mol.%) v okamžiku, kdy rychlost změny koncentrace složky A je $-0,2 \text{ mol m}^{-3} \text{ min}^{-1}$. Počáteční koncentrace složek A a B jsou v tomto případě stejné, $0,0025 \text{ mol dm}^{-3}$.

[42,04 mol.% A, 35,67 mol.% B, 19,10 mol.% C, 3,18 mol.% D]

Řešení:

1. Z údajů v čase τ_1 vypočteme rychlostní konstantu

$$\frac{dc_B}{d\tau} = -8 \cdot 10^{-5} \text{ mol dm}^{-3} \text{ s}^{-1} = -8 \cdot 10^{-5} \text{ mol (10}^{-1} \text{ m)}^{-3} \left(\frac{\text{min}}{60} \right)^{-1} = 4,8 \text{ mol m}^{-3} \text{ min}^{-1}$$

$$c_{A1} = 6 \text{ mol m}^{-3}$$

$$c_{B1} = 8 \cdot 10^{-6} \text{ mol cm}^{-3} = 8 \text{ mol m}^{-3}$$

$$r = -\frac{dc_B}{2 d\tau} = k_c \cdot c_A \cdot c_B$$

$$k_c = \frac{-\frac{dc_B}{2 d\tau}}{c_{A,1} \cdot c_{B,1}} = \frac{-\frac{(-4,8)}{2}}{6 \cdot 8} = 0,05 \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ min}^{-1} \left[\frac{\text{mol m}^{-3} \text{ min}^{-1}}{(\text{mol m}^{-3})^2} = \text{m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ min}^{-1} \right]$$

2. V čase τ_2 :

$$-\frac{dc_A}{d\tau} = 0,2 \text{ mol m}^{-3} \text{ min}^{-1}$$

$$r_2 = -\frac{dc_A}{d\tau} = k_c \cdot c_{A2} \cdot c_{B2}$$

$$\text{balance: } c_{A0} = c_{B0} = 0,0025 \text{ mol dm}^{-3} = 2,5 \text{ mol m}^{-3}$$

$$c_A = c_{A0} - x, \quad dc_A = -dx$$

$$c_B = c_{A0} - 2x$$

$$-\frac{dc_A}{d\tau} = k_c \cdot (c_{A0} - x) \cdot (c_{A0} - 2x)$$

$$0,2 = 0,05 \cdot (2,5 - x) \cdot (2,5 - 2x)$$

$$\frac{0,2}{0,05} = 6,25 - 2,5x - 5x + 2x^2$$

$$x^2 - 3,75x + 1,125 = 0$$

$$x = \frac{3,75}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{3,75}{2}\right)^2 - 1,125} = 1,875 \pm 1,546165$$

1. $x = 1,875 + 1,5462 = 3,4212 > c_{A0}$ - nemá fyzikální smysl

2. $x = 1,875 - 1,5462 = 0,3288 \text{ mol m}^{-3}$

Složení reakční směsi:

$$c_A = c_{A0} - x = 2,5 - 0,3288 = 2,1712 \text{ mol m}^{-3}$$

$$c_B = c_{A0} - 2x = 2,5 - 2 \cdot 0,3288 = 1,8424 \text{ mol m}^{-3}$$

$$c_C = 3x = 3 \cdot 0,3288 = 0,9864 \text{ mol m}^{-3}$$

$$c_D = \frac{1}{2}x = \frac{1}{2} \cdot 0,3288 = 0,1644 \text{ mol m}^{-3}$$

$$\Sigma c = 5,1644$$

$$100 \cdot \frac{c_A}{\Sigma c} = 100 \cdot \frac{2,1712}{5,1644} = 42,04 \text{ mol.\% A}$$

$$100 \cdot \frac{c_B}{\Sigma c} = 100 \cdot \frac{1,8424}{5,1644} = 35,67 \text{ mol.\% B}$$

$$100 \cdot \frac{c_C}{\Sigma c} = 100 \cdot \frac{0,9864}{5,1644} = 19,10 \text{ mol.\% C}$$

$$100 \cdot \frac{c_D}{\Sigma c} = 100 \cdot \frac{0,1644}{5,1644} = 3,18 \text{ mol.\% D}$$