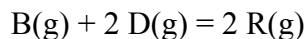


Úloha 1-22 Integrální rovnice třetího řádu, stechiometrický poměr výchozích složek

V systému ideálních plynů probíhá při teplotě 313 K v uzavřeném reaktoru o konstantním objemu elementární reakce třetího řádu



Pro teplotu 313 K je známa hodnoty rychlostní konstanty $k_{cB} = 0,0013 \text{ m}^6 \text{ mol}^{-2} \text{ min}^{-1}$. Vypočítejte jak dlouho bude trvat, než při pokusu, na jehož počátku reaktor obsahoval složky B a D ve stechiometrickém poměru: $p_{B0} = 45 \text{ kPa}$, $p_{D0} = 90 \text{ kPa}$, klesne celkový tlak v reaktoru na hodnotu 95,4 kPa

$$[\tau = 22 \text{ s}]$$

Řešení:

Počáteční složení – stechiometrický poměr:

$$p_{B0} = 45 \text{ kPa} =, \quad p_{D0} = 2 p_{B0} = 90 \text{ kPa}$$

Bilance:

$$c_B = c_{B0} - x = c_{B0} - c_{B0} \cdot \alpha = c_{B0} \cdot (1 - \alpha)$$

$$c_D = c_{D0} - 2 x = c_{D0} - 2 \alpha \cdot c_{B0} = 2c_{B0} - 2 \alpha \cdot c_{B0} = 2c_{B0} \cdot (1 - \alpha)$$

$$c_R = 2 x = 2 \alpha \cdot c_{B0}$$

$$\Sigma c = c_{B0} \cdot (1 - \alpha) + 2c_{B0} \cdot (1 - \alpha) + 2c_{B0} \cdot \alpha = c_{B0} \cdot (3 - \alpha)$$

$$p = \Sigma c \cdot RT = c_{B0} \cdot (3 - \alpha) \cdot RT = p_{B0} \cdot (3 - \alpha)$$

$$(p_{B0} = c_{B0} \cdot RT)$$

$$p_1 = 95,4 \text{ kPa} = 9,54 \cdot 10^4 \text{ Pa} \Rightarrow \alpha_1 = 3 - \frac{p_1}{p_{B0}} = 3 - \frac{95,4}{45} = 0,88$$

Rychlostní rovnice:

k_{cB} je konstanta úměrnosti mezi rychlostí úbytku složky B a součinem koncentrací ($c_B \cdot c_D^2$):

$$-\frac{dc_B}{d\tau} = k_{cB} \cdot c_B \cdot c_D^2, \text{ z bilance: } dc_B = -c_{B0} \cdot d\alpha \quad [1]$$

$$-\left(-\frac{c_{B0} \cdot d\alpha}{d\tau}\right) = k_{cB} \cdot c_{B0} \cdot (1 - \alpha) \cdot [2 c_{B0} \cdot (1 - \alpha)]^2, \quad [2]$$

$$\frac{d\alpha}{d\tau} = 4 \cdot k_{cB} \cdot c_{B0}^2 \cdot (1 - \alpha)^3 = 4 \cdot k_{cB} \cdot \left(\frac{p_{B0}}{RT}\right)^2 \cdot (1 - \alpha)^3 \quad [3]$$

$$\frac{d\alpha}{d\tau} = 4 \cdot 1,3 \cdot 10^{-3} \cdot \underbrace{\left(\frac{45 \cdot 10^3}{8,314 \cdot 313}\right)^2}_A \cdot (1 - \alpha)^3 = A \cdot (1 - \alpha)^3, \quad [4]$$

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

$$\begin{aligned} \int_0^{\tau_1} d\tau &= \frac{1}{A} \cdot \int_0^{\alpha_1} \frac{d\alpha}{(1 - \alpha)^3} \\ \tau_1 &= -\frac{1}{(-2)} \cdot \frac{1}{A} \cdot \left[\frac{1}{(1 - \alpha_1)^2} - 1 \right] \\ \tau_1 &= \frac{1}{2 \cdot 1,555} \cdot \left[\frac{1}{(1 - 0,88)^2} - 1 \right] = 22 \text{ min} \end{aligned}$$