

Úloha 1-41 Teplotní závislost rychlostní konstanty

Reakce $A(g) = 2 R(g) + 3 S(g)$ má při teplotě 720 K rychlostní konstantu $k = 0,126 \text{ h}^{-1}$. Předexponenciální faktor Arrheniovy rovnice má pro tuto reakci hodnotu $6,58 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$. Při jaké teplotě je nutno provádět uvedenou reakci, aby za 22 minut od počátku reakce obsahovala reakční směs 38,095 mol.% složky R?

[807,2 K]

Řešení

$$T_1 = 720 \text{ K}, A = 6,58 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1},$$

$$k_{c1} = 0,126 \text{ h}^{-1} = \frac{0,126}{3600} \text{ s}^{-1} = 3,5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$$

$$\ln k_c = \ln A - \frac{E^*}{RT}$$

$$E^* = RT_1 \cdot (\ln A - \ln k_{c1}) = 8,314 \cdot 720 \cdot (\ln 6,58 \cdot 10^9 - \ln 3,5 \cdot 10^{-5}) = 196747,26 \text{ J mol}^{-1}$$

$$T_2 = ?$$

$$\tau = 22 \text{ min}$$

$$c_A = c_{A0} - x$$

$$c_R = 2x$$

$$c_S = 3x$$

$$\frac{c_R}{\Sigma c} = \frac{2x}{c_{A0} + 4x} = 0,38095$$

$$2x = 0,38095 c_{A0} + 4 \cdot 0,38095 \cdot x$$

$$x = \frac{0,38095}{0,4762} \cdot c_{A0} = 0,8 c_{A0}$$

$$\text{Integrální rovnice prvního řádu: } k_{c2} = \frac{1}{\tau} \cdot \ln \frac{c_{A0}}{c_A} = \frac{1}{22 \cdot 60} \cdot \ln \frac{c_{A0}}{c_{A0} - 0,8 \cdot c_{A0}} = 1,21927 \cdot 10^{-2} \text{ s}^{-1}$$

Tuto hodnotu má k_c při teplotě

$$T_2 = \frac{E^*}{R \cdot (\ln A - \ln k_{c2})} = \frac{196747,26}{8,314 \cdot (\ln 6,58 \cdot 10^9 - \ln 1,21927 \cdot 10^{-2})} = 807,2 \text{ K}$$