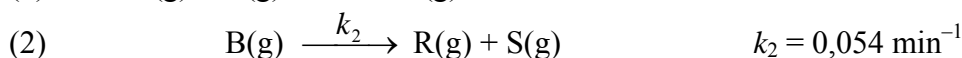


### Úloha 3-29 Bočné konkurenční reakce rozdílných řádů

Do reaktoru o konstantním objemu  $2,5 \text{ dm}^3$  bylo uvedeno  $1,25 \text{ mol}$  látky D,  $0,5 \text{ mol}$  látky B a  $0,025 \text{ mol}$  látky S. V systému probíhají reakce



Reakce (1) je prvního řádu vzhledem k B i vzhledem k D. Po určité době bylo v reakční směsi zjištěno  $1,075 \text{ mol}$  látky D. Vypočítejte složení reakční směsi (v mol.%) v tomto okamžiku.

[60,734 mol.% D; 8,757 mol.% B; 20,904 mol.% S; 9,605 mol.% R]

#### Řešení

$$(3) \quad -\frac{dc_B}{d\tau} = \left(-\frac{dc_B}{d\tau}\right)_1 + \left(-\frac{dc_B}{d\tau}\right)_2 = k_1 \cdot c_D \cdot c_B + k_2 \cdot c_B$$

$$(4) \quad -\frac{dc_D}{d\tau} = k_1 \cdot c_D \cdot c_B$$

$$(5) \quad +\frac{dc_S}{d\tau} = k_1 \cdot c_D \cdot c_B + k_2 \cdot c_B$$

$$(6) \quad +\frac{dc_R}{d\tau} = k_2 \cdot c_B$$

(nelze sledovat B a S – rychlostní rovnice jsou závislé)

Data:  $k_1 = 2 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1} = 2 \cdot 10^{-3} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$

$$k_2 = 0,054 \text{ min}^{-1} = 9 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$$

$$c_{D0} = 1,25/2,5 = 0,5 \text{ mol dm}^{-3}; \quad c_{B0} = 0,5/2,5 = 0,2 \text{ mol dm}^{-3}; \quad c_{S0} = 0,025/2,5 = 0,01 \text{ mol dm}^{-3}$$

v čase  $\tau$   $c_D = 1,075/2,5 = 0,43 \text{ mol dm}^{-3}$

Balance:

$$c_D = c_{D0} - x_1$$

$$c_B = c_{B0} - x_1 - x_2$$

$$c_S = c_{S0} + x_1 + x_2$$

$$c_R = x_2$$

---


$$\Sigma c = c_D + c_B + c_S + c_R = c_{D0} - x_1 + c_{B0} - x_1 - x_2 + c_{S0} + x_1 + x_2 + x_2 =$$

$$= c_{D0} + c_{B0} + c_{S0} - x_1 + x_2$$

$$(4) : \frac{-dc_D}{dc_R} = \frac{k_1 \cdot c_D \cdot c_B}{k_2 \cdot c_B} = \frac{k_1}{k_2} \cdot c_D$$

$$\frac{-d(c_{D0} - x_1)}{dx_2} = \frac{k_1}{k_2} \cdot (c_{D0} - x_1)$$

$$dx_2 = \frac{k_2}{k_1} \cdot \frac{dx_1}{c_{D0} - x_1}$$

$$x_2 = -\frac{k_2}{k_1} \cdot \ln \frac{c_{D0} - x_1}{c_{D0}}$$

v čase  $\tau = 0$   $x_1 = 0$ ,  $x_2 = 0$ ,

v čase  $\tau$   $c_D = 1,075/2,5 = 0,43 \text{ mol dm}^{-3}$

$$x_1 = c_{D0} - c_D = 0,5 - 0,43 = 0,07 \text{ mol dm}^{-3}$$

$$x_2 = \frac{k_2}{k_1} \cdot \ln \frac{c_{D0}}{c_{D0} - x_1} = \frac{9 \cdot 10^{-4}}{2 \cdot 10^{-3}} \ln \frac{0,5}{0,5 - 0,07} = 0,06787 \left[ \frac{\text{s}^{-1}}{\text{dm}^{-3} \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}} \right]$$

$$x_2 = 0,068 \text{ mol dm}^{-3}$$

Okamžité koncentrace:

$$\text{mol.\%} = 100 \, c_i / \Sigma c$$

$$c_D = 0,43 \, \text{mol dm}^{-3} \dots\dots\dots 60,734 \, \text{mol.\% D}$$

$$c_B = 0,2 - 0,07 - 0,068 = 0,43 \, \text{mol dm}^{-3} \dots\dots\dots 8,757 \, \text{mol.\% B}$$

$$c_S = 0,01 + 0,07 + 0,068 = 0,148 \, \text{mol dm}^{-3} \dots\dots\dots 20,904 \, \text{mol.\% S}$$

$$c_R = 0,068 \, \text{mol dm}^{-3} \dots\dots\dots 9,605 \, \text{mol.\% R}$$

---

$$\Sigma c = 0,708$$