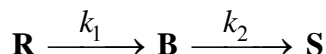


Úloha 3-31 Následné reakce, $k_1 \neq k_2$

V roztoku, který na počátku obsahoval $0,32 \text{ mol dm}^{-3}$ látky R, probíhají následné reakce prvního řádu podle schématu



kde $k_1 = 0,78 \text{ min}^{-1}$ a $k_2 = 0,002 \text{ s}^{-1}$.

(a) Vypočítejte koncentraci jednotlivých složek po 2 minutách od počátku reakce.

(b) Za jak dlouho od tohoto okamžiku bude dosaženo maximální koncentrace meziproduktu B?

[(a) $c_R = 0,0672 \text{ mol dm}^{-3}$; $c_B = 0,218 \text{ mol dm}^{-3}$; $c_S = 0,0348 \text{ mol dm}^{-3}$, (b) maxima bude dosaženo za 50,2 s]

Řešení

$k_1 = 0,78 \text{ min}^{-1}$; $k_2 = 0,002 \text{ s}^{-1} = 0,002 \cdot 60 \text{ min}^{-1} = 0,12 \text{ min}^{-1}$

$\tau = 2 \text{ min}$

Bilance:

$$c_R = c_{R0} - x_1 \quad (c_{R0} = 0,32 \text{ mol dm}^{-3})$$

$$c_B = c_{B0} + x_1 - x_2 \quad (c_{B0} = 0)$$

$$c_S = c_{S0} + x_2 \quad (c_{S0} = 0)$$

$$\Sigma c = c_R + c_B + c_S = c_{R0} = 0,32 \text{ mol dm}^{-3}$$

(a) Koncentrace výchozí látky R

$$-\frac{d c_R}{d \tau} = k_1 \cdot c_R$$

$$c_R = c_{R0} \cdot e^{-k_1 \tau}$$

$$c_R = 0,32 \cdot \exp[-0,78 \cdot 2] = 0,06724 \text{ mol dm}^{-3} \dots\dots\dots 100 \cdot 0,06724/0,32 = 21,01 \text{ mol.\% R}$$

$$-\frac{d c_B}{d \tau} = k_1 \cdot c_R - k_2 \cdot c_B$$

$$c_B = \alpha \cdot e^{-k_2 \tau}$$

$$\cancel{-k_2 \cdot \alpha \cdot e^{-k_2 \tau}} + e^{-k_2 \tau} \cdot \frac{d \alpha}{d \tau} = k_1 \cdot c_{R0} \cdot e^{-k_1 \tau} \cancel{-k_2 \cdot \alpha \cdot e^{-k_2 \tau}}$$

$$\frac{d \alpha}{d \tau} = k_1 \cdot c_{R0} \cdot e^{(k_2 - k_1) \tau}$$

$$\alpha = \frac{k_1 \cdot c_{R0}}{k_2 - k_1} \cdot e^{(k_2 - k_1) \tau} + I$$

$$c_B = \frac{k_1 \cdot c_{R0}}{k_2 - k_1} \cdot e^{-k_1 \tau} + I \cdot e^{-k_2 \tau}$$

$$\tau = 0, c_{B0} = 0: I = -\frac{k_1 \cdot c_{R0}}{k_2 - k_1}$$

$$c_B = \frac{k_1 \cdot c_{R0}}{k_2 - k_1} \cdot (e^{-k_1 \tau} - e^{-k_2 \tau})$$

$$c_B = 0,32 \cdot \frac{0,78}{0,12 - 0,78} \cdot (e^{-0,78 \cdot 2} - e^{-0,12 \cdot 2}) = 0,218 \text{ mol dm}^{-3} \dots\dots\dots 68,125 \text{ mol.\% B}$$

Koncentrace produktu

$$\Sigma c = c_R + c_B + c_S = c_{R0}$$

$$c_S = c_{R0} - c_R - c_B = 0,32 - 0,06724 - 0,218 = 0,03476 \text{ mol dm}^{-3} \dots\dots\dots 10,863 \text{ mol.\% S}$$

(b) Maximální koncentrace meziproduktu

$$\left(\frac{dc_B}{d\tau} \right)_{\max} = 0 = \frac{c_{R0} \cdot k_1}{k_2 - k_1} \cdot \left((-k_1) \cdot e^{-k_1 \cdot \tau_{\max}} - (-k_2) \cdot e^{-k_2 \cdot \tau_{\max}} \right)$$

$$k_1 \cdot e^{-k_1 \cdot \tau_{\max}} = k_2 \cdot e^{-k_2 \cdot \tau_{\max}}$$

$$\tau_{\max} = \frac{1}{k_1 - k_2} \cdot \ln \frac{k_1}{k_2} = \frac{\ln \frac{0,78}{0,12}}{0,78 - 0,12} = 2,836 \text{ min}$$

Maximální koncentrace bude dosaženo za

$$\tau_{\max} - \tau = 2,836 - 2 = 0,836 \text{ min} = 50,12 \text{ s}$$