

### Úloha 3-2 Protisměrné reakce oboustranně prvního řádu, výpočet času

Při teplotě 815,6 K sledujeme protisměrnou reakci oboustranně prvního řádu,  $S(g) \rightleftharpoons R(g)$ . Vypočítejte, za jak dlouho od počátku reakce bude reakční směs obsahovat 18 mol.% složky R. Při teplotě 815,6 K má standardní reakční Gibbsova energie hodnotu  $-1,779 \text{ kJ mol}^{-1}$ , rychlostní konstanta zpětné reakce je  $k_- = 1,15 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ .

[24,16 min]

#### Řešení

$$T = 815,6 \text{ K}$$

$$\Delta_r G^\ominus = -1,779 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$k_- = 1,15 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$$

$$K = \exp\left(-\frac{\Delta_r G^\ominus}{RT}\right) = \exp\left(-\frac{(-1,779 \cdot 10^3)}{8,314 \cdot 815,6}\right) = 1,3$$

$$\frac{K+1}{K} = \frac{1,3+1}{1,3} = 1,76923, \quad K = \frac{k_+}{k_-}, \quad k_+ = K \cdot k_-$$

$$\begin{array}{l} \text{Balance:} \quad c_S = c_{S0} - x = c_{S0} (1 - \alpha) \\ \quad \quad \quad c_R = c_{R0} + x = c_{A0} \alpha, \quad (c_{R0} = 0) \\ \hline \Sigma c = c_{S0} \end{array}$$

$$18 \text{ mol.\% složky R: } \frac{c_R}{\Sigma c} = 0,18 \Rightarrow c_R = 0,18 c_{S0} \Rightarrow \alpha = 0,18$$

$$-\frac{dc_S}{d\tau} = k_{c+} \cdot c_S - k_{c-} \cdot c_R$$

$$c_{S0} \cdot \frac{d\alpha}{d\tau} = k_{c+} \cdot (1 - \alpha) - k_{c-} \cdot c_{S0} \cdot \alpha = k_{c+} \cdot c_{S0} \cdot \left(1 - \alpha \cdot \frac{K_c + 1}{K_c}\right)$$

$$\ln\left(1 - \alpha \cdot \frac{K+1}{K}\right) = -k_{c-} \cdot K \cdot \frac{K+1}{K} \cdot \tau = -k_{c-} \cdot (K+1) \cdot \tau$$

$$(K_c = K)$$

$$\tau = \frac{\ln\left(1 - \alpha \cdot \frac{K+1}{K}\right)}{-k_{c-} \cdot (K+1)} = \frac{\ln\left(1 - 0,18 \cdot \frac{1,3+1}{1,3}\right)}{(-1,15 \cdot 10^{-4} \cdot 2,3)} = 1449,537 \text{ s} = 24,16 \text{ min}$$