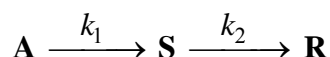


### Úloha 3-32 Následné reakce, $k_1 \ll k_2$

V roztoku, který na počátku obsahoval látky A a R v koncentracích  $c_{A0} = 0,6 \text{ mol dm}^{-3}$  a  $c_{R0} = 0,2 \text{ mol dm}^{-3}$  probíhají při teplotě  $75^\circ\text{C}$  následné reakce



Rychlostní konstanty mají hodnoty  $k_1 = 7,2 \cdot 10^{-3} \text{ h}^{-1}$  a  $k_2 = 0,5 \text{ s}^{-1}$ . Vypočítejte koncentrace všech složek a složení reakční směsi v mol.% po 2 hodinách od počátku reakce.

$$[c_A = 0,5914 \text{ mol dm}^{-3}; c_S = 2,37 \cdot 10^{-6} \text{ mol dm}^{-3}; c_R = 0,2086 \text{ mol dm}^{-3}; \\ 73,925 \text{ mol.\% A}; 2,957 \cdot 10^{-4} \text{ mol.\% S}; 26,07 \text{ mol.\% R}]$$

#### Řešení

$$k_1 = 7,2 \cdot 10^{-3} \text{ h}^{-1} = 7,2 \cdot 10^{-3} / 3600 \text{ s}^{-1} = 2 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$$

$$k_2 = 0,5 \text{ s}^{-1}$$

$$k_1 \ll k_2$$

$$\tau = 2 \text{ h} = 7600 \text{ s}$$

$$c_A = c_{A0} - x_1 \quad (c_{A0} = 0,6 \text{ mol dm}^{-3})$$

$$c_S = c_{S0} + x_1 - x_2 \quad (c_{S0} = 0)$$

$$c_R = c_{R0} + x_2 \quad (c_{R0} = 0,2 \text{ mol dm}^{-3})$$

$$\Sigma c = c_A + c_S + c_R = c_{A0} + c_{R0} = 0,8 \text{ mol dm}^{-3}$$

Koncentrace výchozí látky A

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

$$c_A = c_{A0} \cdot e^{-k_1 \tau} = 0,6 \cdot \exp(-7,2 \cdot 10^{-3} \cdot 2) = 0,5914 \text{ mol dm}^{-3}$$

$$\dots\dots\dots 100 \cdot 0,5914 / 0,8 = 73,925 \text{ mol.\% A}$$

Koncentrace meziproduktu S

$$-\frac{d c_S}{d \tau} = k_1 \cdot c_A - k_2 \cdot c_S$$

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

$$-k_2 \cdot \alpha \cdot e^{-k_2 \tau} + e^{-k_2 \tau} \cdot \frac{d \alpha}{d \tau} = k_1 \cdot c_{A0} \cdot e^{-k_1 \tau} - k_2 \cdot \alpha \cdot e^{-k_2 \tau}$$

$$\frac{d \alpha}{d \tau} = k_1 \cdot c_{A0} \cdot e^{(k_2 - k_1) \tau}$$

$$\alpha = \frac{k_1 \cdot c_{A0}}{k_2 - k_1} \cdot e^{(k_2 - k_1) \tau} + I$$

$$c_S = \frac{k_1 \cdot c_{A0}}{k_2 - k_1} \cdot e^{-k_1 \tau} + I \cdot e^{-k_2 \tau}$$

$$\tau = 0, c_{S0} = 0: I = -\frac{k_1 \cdot c_{A0}}{k_2 - k_1}$$

$$c_S = \frac{k_1 \cdot c_{A0}}{k_2 - k_1} \cdot (e^{-k_1 \tau} - e^{-k_2 \tau})$$

$$k_1 \ll k_2 \Rightarrow e^{-k_1 \tau} \gg e^{-k_2 \tau} (\exp(-0,5 \cdot 2 \cdot 3600) = 0, \exp(-7,2 \cdot 10^{-3} \cdot 2) = 0,9857)$$

- řídící děj je první reakce

$$c_S = \frac{k_1 \cdot c_{A0}}{k_2} \cdot e^{-k_1 \tau} = 0,6 \cdot \frac{2 \cdot 10^{-6}}{0,5} \cdot \exp(-7,2 \cdot 10^{-3} \cdot 2)$$

$$c_S = 2,365 \cdot 10^{-6} \text{ mol dm}^{-3} \dots\dots\dots 100 \cdot 2,365 \cdot 10^{-6} / 0,8 = 2,957 \cdot 10^{-4} \text{ mol.\% S}$$

Koncentrace produktu R:

$$\Sigma C = c_A + c_S + c_R = c_{A0} + c_{R0}$$

$$c_R = c_{A0} + c_{R0} - c_A - c_S = 0,6 + 0,2 - 0,5914 - 2,365 \cdot 10^{-6}$$

$$c_R = 0,2086 \text{ mol dm}^{-3} \dots\dots\dots 100 \cdot 0,2086 / 0,8 = 26,07 \text{ mol.\% R}$$