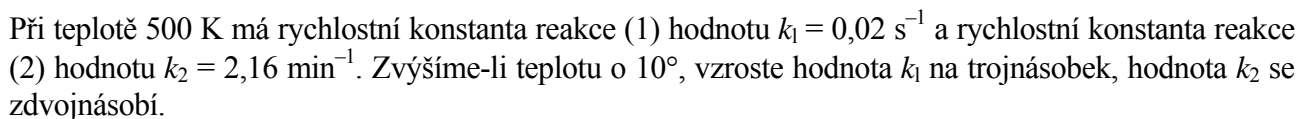


Látka B se rozkládá dvěma bočnými jednosměrnými. reakcemi na produkty R a S:



- (a) Vypočítejte složení konečné směsi (v mol.%), kterou dostaneme, budeme-li rozklad látky B provádět při teplotě 500 K dostatečně dlouhou dobu, takže veškerá původně přítomná složka B zreaguje.
- (b) Jak by se změnil výtěžek složky S, kdybychom se dopustili v nastavení teploty chyby a reakci prováděli při 510 K místo při 500 K?

### Řešení

$$T = 500 \text{ K}, \quad k_1 = 0,02 \text{ s}^{-1}, \quad k_2 = 2,16 \text{ min}^{-1} = 0,036 \text{ s}^{-1}$$

$$T' = 510 \text{ K}, \quad k'_1 = 3 k_1 = 0,06 \text{ s}^{-1}, \quad k'_2 = 2 k_2 = 0,072 \text{ s}^{-1}$$

*Balance:*

$c_B = c_{B0} - x_1 - x_2$
$c_R = x_1$
$c_S = x_2$
<hr/>
$\Sigma c = c_R + c_R + c_R = c_{R0}$

Pro součet přeměn po úplném zreagování B platí

$$\tau \rightarrow \infty, \quad c_{B\infty} = c_{B0} - x_{1\infty} - x_{2\infty} = 0 \quad \Rightarrow \quad x_{1\infty} + x_{2\infty} = c_{B0}$$

Poměr  $x_{1\infty} / x_{2\infty}$ :

$$\frac{dc_R}{d\tau} = \frac{dx_1}{d\tau} = k_1 \cdot c_B \quad \text{a} \quad \frac{dc_S}{d\tau} = \frac{dx_2}{d\tau} = k_2 \cdot c_B$$

$$\frac{dx_2}{dx_1} = \frac{k_2 \cdot c_B}{k_1 \cdot c_B} = \frac{k_2}{k_1}, \quad x_2 = \frac{k_2}{k_1} \cdot x_1 = \frac{0,036}{0,02} \cdot x_1 = 1,8 \cdot x_1$$

$$x_{1\infty} + 1,8 x_{1\infty} = c_{B0}$$

$$x_{1\infty} = c_{R\infty} = 1/2,8 \cdot c_{B0} = 0,35714 \cdot c_{B0} \dots\dots\dots 100 \cdot \frac{c_{R\infty}}{\Sigma c} = 100 \cdot 0,35714 \cdot c_{B0} / c_{B0} = 35,714 \text{ mol.\% R}$$

$$x_{2\infty} = c_{S\infty} = 1,8 \quad x_{1\infty} = 0,64286 \quad c_{B0} \quad \dots\dots\dots 100 \cdot \frac{c_{S\infty}}{\Sigma c_i} = 100 \cdot 0,64286 \quad c_{B0} / c_{B0} = 64,286 \text{ mol.\% S}$$

$c_{B\infty} = 0$  ..... 0 mol.% B

(b) Při  $T' = 510$  K

$$x'_2 = \frac{k'_2}{k'_1} \cdot x'_1 = \frac{0,072}{0,06} \cdot x'_1 = 1,2 x'_1$$

$$x'_{1\infty} + 1,2 x'_{1\infty} = c_{B0}$$

$$x'_{1\infty} = c'_{R\infty} = (1/2, 2) c_{B0} = 0,45455 c_{B0} \quad \cdot 100 \cdot \frac{\dot{c}_{R\infty}}{\Sigma c} = 100 \cdot 0,45455 c_{B0} / c_{B0} = 45,455 \text{ mol.\% R}$$

$$x'_{2\infty} = c'_{S\infty} = 1,2 \quad x'_{1\infty} = 0,54545 \text{ c}_{B0} \quad \dots\dots\dots 100 \cdot \frac{c'_{S\infty}}{\Sigma c} = 100 \cdot 0,54545 \text{ c}_{B0} / \text{c}_{B0} = 54,545 \text{ mol.\% S}$$

$c_{B\infty} = 0$  ..... 0 mol.% B