

### Úloha 3-1 Protisměrné reakce oboustranně prvního řádu, výpočet přeměny

V systému ideálních plynů probíhá při teplotě 550,6 K protisměrná reakce oboustranně prvního řádu,  $A \rightleftharpoons B$ , jejíž standardní reakční Gibbsova energie má hodnotu  $\Delta_r G^\ominus = -1,5403 \text{ kJ mol}^{-1}$ . Rychlostní konstanta přímé reakce má hodnotu  $k_+ = 2,3 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ . Vypočítejte, kolik látky A (v procentech původně přítomné A) se přemění na látku B za jednu hodinu a 3 minuty od počátku reakce.

[45,192%]

#### Řešení

$$T = 550,6 \text{ K}$$

$$\Delta_r G^\ominus = -1,5403 \text{ kJ mol}^{-1} \quad K = \exp\left(-\frac{\Delta_r G^\ominus}{RT}\right) = \exp\left(-\frac{(-1,5403 \cdot 10^3)}{8,314 \cdot 550,6}\right) = 1,400011$$

$$\begin{aligned} \text{Bilance:} \quad c_A &= c_{A0} - x = c_{A0} (1 - \alpha) \\ c_B &= x = c_{A0} \alpha \end{aligned}$$

Rychlostní rovnice:

$$-\frac{dc_A}{d\tau} = k_{c+} \cdot c_A - k_{c-} \cdot c_B$$

$$c_{A0} \cdot \frac{d\alpha}{d\tau} = k_{c+} \cdot c_{A0} \cdot (1 - \alpha) - k_{c-} \cdot c_{A0} \cdot \alpha = k_{c+} \cdot c_{A0} \cdot \left(1 - \alpha \cdot \frac{K_c + 1}{K_c}\right)$$

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

$$(K_c = K)$$

$$\tau = 1 \text{ h } 3 \text{ min} = 3780 \text{ s}, \quad \frac{K + 1}{K} = \frac{1,4 + 1}{1,4} = 1,5$$

$$k_+ = 2,3 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$$

$$\ln\left(1 - \alpha \cdot \frac{K + 1}{K}\right) = -2,3 \cdot 10^{-4} \cdot \frac{1,4 + 1}{1,4} \cdot 3780 = -1,4904$$

$$1 - \alpha \cdot \frac{1,4 + 1}{1,4} = 0,2252825$$

$$\alpha = 0,45192 \quad \dots \text{ zreaguje } 45,192 \% \text{ látky A}$$