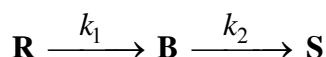


Úloha 3-33 Následné reakce, $k_1 = k_2$

Rozklad sloučeniny R probíhá. ve vodném roztoku podle schématu



Při 60°C mají rychlostní konstanty tyto hodnoty: $k_1 = 0,006 \text{ s}^{-1}$, $k_2 = 0,36 \text{ min}^{-1}$. 100 cm³ roztoku obsahuje na počátku 3,92 g látky R ($M = 196 \text{ g mol}^{-1}$) a 0,005 mol meziproductu B.

(a) Jak dlouho je vhodné provádět reakci, abychom dosáhli maximálního výtěžku látky B?

Vypočítejte, kolik gramů B ($M = 87 \text{ g mol}^{-1}$) můžeme tímto způsobem získat.

(b) Jaká je koncentrace látky S v tomto okamžiku?

$$[(a) \tau = 125 \text{ s}; m_B = 0,822 \text{ g}; (b) c_S = 0,061 \text{ mol dm}^{-3}]$$

Řešení

$$k_1 = 0,006 \text{ s}^{-1} \quad k_2 = 0,36 \text{ min}^{-1} = 0,36/60 \text{ s}^{-1} = 0,006 \text{ s}^{-1} \quad \Rightarrow \quad k_1 = k_2$$

$$V = 100 \text{ cm}^3 = 0,1 \text{ dm}^3$$

$$m_{R0} = 3,92 \text{ g}$$

$$M_R = 196 \text{ g mol}^{-1}$$

$$n_{B0} = 0,005 \text{ mol}$$

Bilance:

$$c_R = c_{R0} - x_1 \quad c_{R0} = \frac{m_{R0}}{M_R \cdot V} = \frac{3,92}{196 \cdot 100 \cdot 10^{-3}} = 0,2 \text{ mol dm}^{-3}$$

$$c_B = c_{B0} + x_1 - x_2 \quad c_{B0} = \frac{n_{B0}}{V} = \frac{0,005}{100 \cdot 10^{-3}} = 0,05 \text{ mol dm}^{-3}$$

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

$$\Sigma c = c_R + c_B + c_S = c_{R0} + c_{B0}$$

(a) $\tau_{\max} = ?$

Rychlostní rovnice

Výchozí látka R

$$-\frac{d c_R}{d \tau} = k \cdot c_R \quad \Rightarrow \quad c_R = c_{R0} \cdot e^{-k \cdot \tau}$$

Meziproduct B

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

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

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

$$\frac{d \alpha}{d \tau} = k \cdot c_{R0} \quad \Rightarrow \quad \alpha = k \cdot c_{R0} \cdot \tau + I$$

$$c_B = k \cdot c_{R0} \cdot \tau \cdot e^{-k \cdot \tau} + I \cdot e^{-k \cdot \tau}$$

$$\tau = 0, c_{B0}: \quad I = c_{B0}$$

$$c_B = k \cdot c_{R0} \cdot \tau \cdot e^{-k \cdot \tau} + c_{B0} \cdot e^{-k \cdot \tau} = e^{-k \cdot \tau} \cdot (k \cdot c_{R0} \cdot \tau + c_{B0})$$

Produkt S

$$\Sigma c = c_R + c_B + c_S = c_{R0} + c_{B0} \quad \Rightarrow \quad c_S = c_{R0} + c_{B0} - c_R - c_B$$

Maximální koncentrace meziprojektu

$$\frac{d c_B}{d \tau} = 0 = -k \cdot e^{-k \cdot \tau_{\max}} \cdot (k \cdot c_{R0} \cdot \tau_{\max} + c_{B0}) + e^{-k \cdot \tau_{\max}} \cdot k \cdot c_{R0}$$

$$\tau_{\max} = \frac{c_{R0} - c_{B0}}{k \cdot c_{R0}} = \frac{0,2 - 0,05}{0,006 \cdot 0,2} = 125 \text{ s}$$

$$c_{B\max} = e^{-k \cdot \tau_{\max}} \cdot (k \cdot c_{R0} \cdot \tau_{\max} + c_{B0}) = (\cancel{k \cdot c_{R0}} \cdot \frac{c_{R0} - c_{B0}}{\cancel{k \cdot c_{R0}}} + c_{B0}) \cdot \exp\left(\frac{c_{B0} - c_{R0}}{c_{R0}}\right)$$

$$c_{B\max} = c_{R0} \cdot \exp\left(\frac{c_{B0} - c_{R0}}{c_{R0}}\right) = 0,2 \cdot \exp\left(\frac{0,05 - 0,2}{0,2}\right) = 0,094473 \text{ mol dm}^{-3}$$

$$m_{B\max} = c_{B\max} \cdot V \cdot M_B = 0,094473 \cdot 100 \cdot 10^{-3} \cdot 87 = 0,822 \text{ g}$$
$$\left[(\text{mol dm}^{-3}) \cdot \text{dm}^3 \cdot (\text{g mol}^{-1}) = \text{g} \right]$$

(b) Koncentrace produktu

$$\Sigma c = c_R + c_B + c_S = c_{R0} + c_{B0}$$

$$c_S(\tau_{\max}) = c_{R0} + c_{B0} - c_R(\tau_{\max}) - c_B(\tau_{\max}) = 0,2 + 0,05 - 0,094473 - 0,094473$$

$$c_R(\tau_{\max}) = c_{R0} \cdot \exp(-k \cdot \tau_{\max}) = 0,2 \cdot \exp(-0,006 \cdot 125) = 0,094473 \text{ mol dm}^{-3}$$

$$c_S(\tau_{\max}) = 0,061 \text{ mol dm}^{-3}$$