

Úloha 3-5 Protisměrné reakce oboustranně prvního řádu, výpočet přeměny

Reakce $\text{B(l)} \rightleftharpoons \text{S(l)}$ probíhá jako protisměrná reakce oboustranně prvního řádu. Při teplotě 675 K je rovnovážný stupeň přeměny $\alpha_{\text{rov}} = 2/3$. Rychlostní konstanta přímé reakce má při této teplotě hodnotu $k_+ = 0,0138 \text{ min}^{-1}$. Vypočítejte, kolik látky B (v procentech původně přítomné B) se přemění na látku S za 1 hodinu a 18 minut od počátku reakce, je-li v systému na počátku přítomna pouze látka B. Jaká by byla tato hodnota, kdybyste zanedbali zpětnou reakci a pochod považovali za jednosměrný? Aktivitní koeficienty všech látek jsou rovny jedné.

[53,4 %; 65,92 %]

Řešení

$$T = 675 \text{ K}$$

$$k_+ = 0,0138 \text{ min}^{-1}$$

$$\tau = 1 \text{ h } 18 \text{ min} = 78 \text{ min}$$

$$\begin{array}{l} \text{Bilance:} \quad c_{\text{B}} = c_{\text{B0}} - x = c_{\text{B0}} (1 - \alpha) \\ \quad \quad \quad c_{\text{S}} = c_{\text{S0}} + x = c_{\text{S0}} + c_{\text{B0}} \alpha, \quad c_{\text{S0}} = 0 \\ \hline \Sigma c = c_{\text{B0}} \end{array}$$

Výpočet K:

$$\alpha_{\text{rov}} = 2/3$$

$$K = \frac{c_{\text{Srov}}}{c_{\text{Brov}}} = \frac{c_{\text{B0}} \cdot \alpha_{\text{rov}}}{c_{\text{B0}} \cdot (1 - \alpha_{\text{rov}})} = \frac{2/3}{1 - 2/3} = 2$$

Rychlostní rovnice:

$$-\frac{dc_{\text{B}}}{d\tau} = k_{c+} \cdot c_{\text{B}} - k_{c-} \cdot c_{\text{B}}$$

$$c_{\text{B0}} \cdot \frac{d\alpha}{d\tau} = k_{c+} \cdot c_{\text{B0}} \cdot (1 - \alpha) - k_{c-} \cdot c_{\text{B0}} \cdot \alpha = k_{c+} \cdot c_{\text{B0}} \cdot \left(1 - \alpha \cdot \frac{K_c + 1}{K_c}\right)$$

$$\ln \frac{c_{\text{B0}}}{c_{\text{B0}} - \alpha \cdot c_{\text{B0}} \cdot \left(\frac{K_c + 1}{K_c}\right)} = k_{c+} \cdot \frac{K_c + 1}{K_c} \cdot \tau, \quad K_c = K$$

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

$$\ln \left(1 - \alpha \cdot \frac{2 + 1}{2}\right) = -0,0138 \cdot \frac{2 + 1}{2} \cdot 78 = -1,6146$$

$$1 - \alpha \cdot 1,5 = 0,19897$$

$$\alpha = 0,534 \quad \dots\dots \text{ B se přemění na S z 53,4 \%}$$

Jednosměrná reakce:

$$-\frac{dc_{\text{B}}}{d\tau} = k_{c+} \cdot c_{\text{B}}$$

$$\ln \frac{c_{\text{B}}}{c_{\text{B0}}} = \ln \frac{c_{\text{B0}} \cdot (1 - \alpha)}{c_{\text{B0}}} = -k_{c+} \cdot \tau$$

$$\ln (1 - \alpha) = -0,0138 \cdot 78 = -1,0764$$

$$1 - \alpha = 0,34082$$

$$\alpha = 0,65918 \quad \dots\dots \text{ přeměna B na S je 65,918 \%}$$