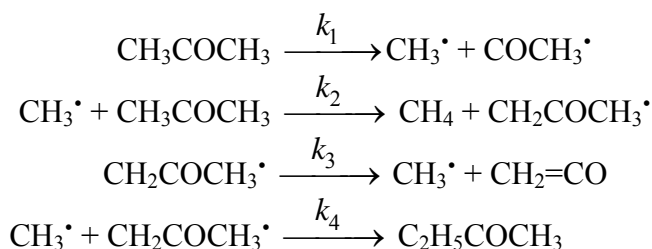


### Úloha 4-17 Řešení reakčních schémat

Tepelný rozklad acetonu na metan a keten je reakcí prvního řádu, pro jejíž mechanismus bylo navrženo schéma:

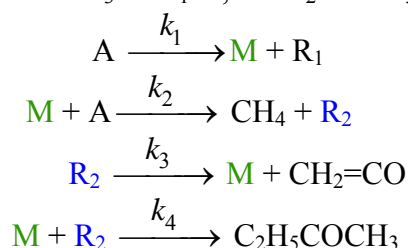


Dokažte, že tento mechanismus vyhovuje experimentálně stanovenému prvnímu řádu reakce.

$$\left[ -\frac{dc_A}{d\tau} = \left[ k_1 + k_2 \cdot \frac{k_1 \pm (k_1^2 + 8 k_1 \cdot k_2 \cdot k_3 / k_4)^{1/2}}{4 k_2} \right] = \text{konst} \cdot c_A \quad - \text{první řád} \right]$$

### Řešení

$\text{CH}_3\text{COCH}_3 = A$  ,  $\text{CH}_3^\bullet = M$  ,  $\text{COCH}_3^\bullet = R_1$  ,  $\text{CH}_2\text{COCH}_3^\bullet = R_2$



$$\frac{dc_M}{d\tau} = 0 = k_1 \cdot c_A - k_2 \cdot c_M \cdot c_A + k_3 \cdot c_{R2} - k_4 \cdot c_M \cdot c_{R2}$$

$$r_1 - r_2 + r_3 - r_4 = 0$$

$$\frac{dc_{R2}}{d\tau} = 0 = k_2 \cdot c_M \cdot c_A - k_3 \cdot c_{R2} - k_4 \cdot c_M \cdot c_{R2}$$

$$r_2 - r_3 - r_4 = 0$$

$$r_1 = 2 r_4$$

$$k_1 \cdot c_A = 2 k_4 \cdot c_M \cdot c_{R2}$$

$$c_{R2} = \frac{k_1}{2 k_4} \cdot \frac{c_A}{c_M}$$

$$\frac{dc_{R2}}{d\tau} = 0 = k_2 \cdot c_M \cdot c_A - k_3 \cdot \frac{k_1}{2 k_4} \cdot \frac{c_A}{c_M} - \cancel{k_4} \cdot c_M \cdot \frac{k_1}{2 \cancel{k_4}} \cdot \frac{c_A}{\cancel{c_M}}$$

$$0 = 2 k_4 \cdot k_2 \cdot c_M^2 - k_1 \cdot k_4 \cdot c_M - k_3 \cdot k_1$$

$$c_M = \frac{+k_1 \cdot k_4 \pm \left[ (k_1 \cdot k_4)^2 - 4 \cdot (2 \cdot k_4 \cdot k_2) \cdot (-k_1 \cdot k_3) \right]^{1/2}}{4 k_4 \cdot k_2} = \frac{k_1 \pm \left[ k_1^2 + (8 k_1 \cdot k_2 \cdot k_3) / k_4 \right]^{1/2}}{4 k_2}$$

$$-\frac{dc_A}{d\tau} = k_1 \cdot c_A + k_2 \cdot c_M \cdot c_A = k_1 + k_2 \cdot \underbrace{\frac{k_1 \pm \left[ k_1^2 + (8 k_1 \cdot k_2 \cdot k_3) / k_4 \right]^{1/2}}{4 k_2}}_{\text{konst}} \cdot c_A$$

$$-\frac{dc_A}{d\tau} = \text{konst} \cdot c_A \quad - \text{rychlostní rovnice prvního řádu}$$