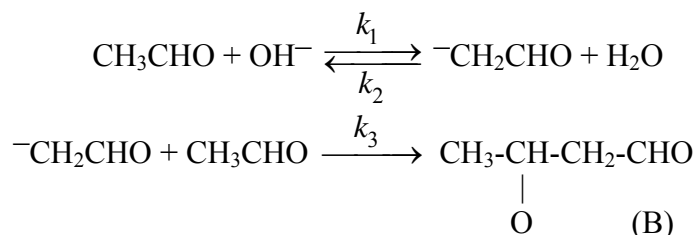


Úloha 4-13 Řešení reakčních schémat

Aldolová kondenzace acetaldehydu je v širokém rozmezí koncentrací vodíkových iontů reakcí prvního řádu vzhledem k acetaldehydu a reakcí prvního řádu vzhledem k hydroxylovým iontům. Pro tuto reakci byl navržen mechanismus:



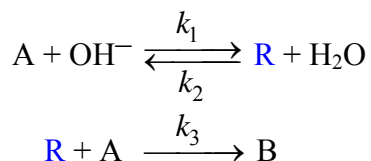
Stanovte, za jakých předpokladů navržené schéma vyhovuje experimentálně stanovenému tvaru rychlostní rovnice:

$$r = \frac{dc_B}{d\tau} = k_c \cdot c_{\text{CH}_3\text{CHO}} \cdot c_{\text{OH}^-}$$

$$\left[\text{pro } k_2 \cdot c_{\text{H}_2\text{O}} \ll k_3 \cdot c_A : \frac{dc_B}{d\tau} = k_1 \cdot c_{\text{CH}_3\text{CHO}} \cdot c_{\text{OH}^-} \right]$$

Řešení

Označení: $A \equiv \text{CH}_3\text{CHO}$, $R \equiv {}^-\text{CH}_2\text{CHO}$, $B \equiv \text{CH}_3-\underset{\text{O}}{\underset{|}{\text{CH}}}-\text{CH}_2-\text{CHO}$



$$r = \frac{dc_B}{d\tau} = k_3 \cdot c_A \cdot c_R$$

Nestálý meziprodukt R:

$$\frac{dc_R}{d\tau} = 0 = k_1 \cdot c_A \cdot c_{\text{OH}^-} - k_2 \cdot c_R \cdot c_{\text{H}_2\text{O}} - k_3 \cdot c_R \cdot c_A \quad \Rightarrow \quad c_R = \frac{k_1 \cdot c_A \cdot c_{\text{OH}^-}}{k_2 \cdot c_{\text{H}_2\text{O}} + k_3 \cdot c_A}$$

$$\frac{dc_B}{d\tau} = k_3 \cdot c_A \cdot \frac{k_1 \cdot c_A \cdot c_{\text{OH}^-}}{k_2 \cdot c_{\text{H}_2\text{O}} + k_3 \cdot c_A}$$

Pro $k_2 \cdot c_{\text{H}_2\text{O}} \ll k_3 \cdot c_A$

$$\frac{dc_B}{d\tau} = \cancel{k_3 \cdot c_A} \cdot \frac{k_1 \cdot c_A \cdot c_{\text{OH}^-}}{\cancel{k_2 \cdot c_{\text{H}_2\text{O}}} + \cancel{k_3 \cdot c_A}}$$

$$\frac{dc_B}{d\tau} = k_1 \cdot c_A \cdot c_{\text{OH}^-}$$