

03 Simultánní reakce v roztoku, výpočet rovnovážného složení

V ideálním roztoku, který na počátku obsahoval $0,1 \text{ mol dm}^{-3}$ látky A probíhají dvě reakce:



jejichž rovnovážné konstanty pro standardní stav: nekonečné zředění, $c^{\text{st}} = 1 \text{ mol dm}^{-3}$ mají hodnoty $K_1 = 0,32$ a $K_2 = 1,28$. Vypočítejte složení rovnovážné směsi rozpuštěných látek A,B,D, R a S (v mol.%).

[1,652 mol.% A; 16,391 mol % R; 16,391 mol % S; 32,783 mol % B; 32,783 mol % D]

Řešení:

Bilance:

$$c_A = c_{A0} - x_1 - x_2$$

$$c_R = x_1$$

$$c_S = x_1$$

$$c_B = x_2$$

$$c_D = x_2$$

$$\Sigma c = c_{A0} + x_1 + x_2$$

$$\text{ideální roztok: } a_i = c_i / c^{\text{st}} \quad (\gamma_i = 1)$$

$$\left. \begin{aligned} K_1 &= \frac{c_R \cdot c_S}{c_A} \cdot \frac{1}{c^{\text{st}}} = \frac{x_1^2}{c_{A0} - x_1 - x_2} \quad (c^{\text{st}} = 1 \text{ mol dm}^{-3}) \\ K_2 &= \frac{c_B \cdot c_D}{c_A} \cdot \frac{1}{c^{\text{st}}} = \frac{x_2^2}{c_{A0} - x_1 - x_2} \quad (c^{\text{st}} = 1 \text{ mol dm}^{-3}) \end{aligned} \right\} \frac{x_2}{x_1} = \left(\frac{K_2}{K_1} \right)^{1/2} = \left(\frac{1,28}{0,32} \right)^{1/2} = 2$$

$$K_2 = 1,28 = \frac{4 x_1^2}{0,1 - x_1 - 2 x_1}$$

$$4 x_1^2 + 3,84 x_1 - 0,128 = 0$$

$$x_1 = \frac{-3,84 \pm (3,84^2 + 4 \cdot 4 \cdot 0,128)^{1/2}}{2 \cdot 4} = 0,03225$$

$$x_2 = 2 \cdot 0,03225 = 0,0645$$

$$c_A = 0,1 - 0,03225 - 0,0645 = 0,00325 \dots\dots\dots 1,652 \text{ mol.\% A}$$

$$c_R = 0,03225 \dots\dots\dots 16,391 \text{ mol \% R}$$

$$c_S = 0,03225 \dots\dots\dots 16,391 \text{ mol \% S}$$

$$c_B = 0,0645 \dots\dots\dots 32,783 \text{ mol \% B}$$

$$c_D = 0,0645 \dots\dots\dots 32,783 \text{ mol \% D}$$

$$\Sigma c = 0,1 + 0,03225 + 0,0645 = 0,19675$$