

10. PŘEHLED KINETICKÝCH ROVNIC PRO JEDNODUCHÉ HOMOGENNÍ REAKCE VE VSÁDKOVÝCH REAKTORECH

10.1	Jednosměrné reakce nultého řádu $\nu_A A \rightarrow$ produkty.....	2
10.2	Jednosměrné reakce prvního řádu $\nu_A A \rightarrow$ produkty.....	2
10.3	Jednosměrné reakce druhého řádu	2
10.3.1	$\nu_A A \rightarrow$ produkty	2
10.3.2	$\nu_A A + \nu_B B \rightarrow$ produkty, $\alpha = \beta = 1$, $c_{A0}/ \nu_A = c_{B0}/ \nu_B $	3
10.3.3	$\nu_A A + \nu_B B \rightarrow$ produkty, $\alpha = \beta = 1$, $c_{A0}/ \nu_A \neq c_{B0}/ \nu_B $	3
10.4	Jednosměrné reakce n -tého řádu	4
10.4.1	$\nu_A A \rightarrow$ produkty	4
10.4.2	$\nu_A A + \nu_B B \rightarrow$ produkty.....	4
10.5	Protisměrné reakce.....	5
10.5.1	Reakce oboustranně prvního řádu	5
10.5.2	Přímá reakce prvního řádu, zpětná druhého řádu.....	5
10.5.3	Přímá reakce druhého řádu, zpětná prvního řádu.....	6
10.5.4	Přímá i zpětná reakce druhého řádu.....	6
10.6	Bočné reakce.....	7
10.6.1	Rozvětvené reakce prvního řádu	7
10.6.2	Rozvětvené reakce druhého řádu	7
10.6.3	Rozvětvené reakce druhého řádu	7
10.6.4	Konkurenční bočné reakce.....	8
10.7	Následné reakce	9
10.7.1	Reakce prvního řádu, $k_1 \neq k_2$	9
10.7.2	Reakce prvního řádu, $k_1 \gg k_2$	9
10.7.3	Reakce prvního řádu, $k_1 \ll k_2$	9
10.7.4	Reakce prvního řádu, $k_1 = k_2$	9

10.1 JEDNOSMĚRNÉ REAKCE NULTÉHO ŘÁDU $\nu_A A \rightarrow \text{PRODUKTY}$

Bilance: $c_A = c_{A0} - |\nu_A| x = c_{A0} - c_{A0} \cdot \alpha_A$

Diferenciální rovnice:

$$\begin{aligned} -\frac{dc_A}{d\tau} &= |\nu_A| \cdot k_c \\ \frac{dx}{d\tau} &= |\nu_A| \cdot k_c \\ \frac{d\alpha_A}{d\tau} &= \frac{|\nu_A|}{c_{A0}} \cdot k_c \end{aligned}$$

Integrální rovnice:

$$\begin{aligned} c_A &= c_{A0} - |\nu_A| \cdot k_c \cdot \tau \\ x &= -|\nu_A| \cdot k_c \cdot \tau \\ \alpha_A &= -\frac{|\nu_A|}{c_{A0}} \cdot k_c \cdot \tau \end{aligned}$$

Poločas $\tau_{1/2} = \frac{c_{A0}}{2|\nu_A| \cdot k_c}$

10.2 JEDNOSMĚRNÉ REAKCE PRVÉHO ŘÁDU $\nu_A A \rightarrow \text{PRODUKTY}$

Bilance: $c_A = c_{A0} - |\nu_A| x = c_{A0} - c_{A0} \cdot \alpha_A$

Diferenciální rovnice:

$$\begin{aligned} -\frac{dc_A}{d\tau} &= |\nu_A| \cdot k_c \cdot c_A \\ \frac{dx}{d\tau} &= |\nu_A| \cdot k_c \cdot (c_{A0} - x) \\ \frac{d\alpha_A}{d\tau} &= |\nu_A| \cdot k_c \cdot (1 - \alpha_A) \end{aligned}$$

Integrální rovnice:

$$\begin{aligned} \ln \frac{c_{A0}}{c_A} &= |\nu_A| \cdot k_c \cdot \tau \\ \ln \frac{c_{A0}}{c_{A0} - x} &= |\nu_A| \cdot k_c \cdot \tau \\ \ln \frac{1}{1 - \alpha_A} &= |\nu_A| \cdot k_c \cdot \tau \end{aligned}$$

Poločas $\tau_{1/2} = \frac{\ln 2}{|\nu_A| \cdot k_c}$

10.3 JEDNOSMĚRNÉ REAKCE DRUHÉHO ŘÁDU

10.3.1 $\nu_A A \rightarrow \text{PRODUKTY}$

$\nu_A A + \nu_B B \rightarrow \text{PRODUKTY}$, $\alpha = \beta = 1$, stejné počáteční koncentrace $c_{A0} = c_{B0}$

Bilance: $c_A = c_{A0} - |\nu_A| x = c_{A0} - c_{A0} \cdot \alpha_A$
 $c_B = c_{A0} - |\nu_A| x = c_{A0} - c_{A0} \cdot \alpha_A = c_A$

Diferenciální rovnice:

$$\begin{aligned} -\frac{dc_A}{d\tau} &= |\nu_A| \cdot k_c \cdot c_A^2 \\ \frac{dx}{d\tau} &= |\nu_A| \cdot k_c \cdot (c_{A0} - x)^2 \\ \frac{d\alpha_A}{d\tau} &= |\nu_A| \cdot k_c \cdot c_{A0} \cdot (1 - \alpha_A)^2 \end{aligned}$$

Integrální rovnice:

$$\begin{aligned} \frac{1}{c_A} - \frac{1}{c_{A0}} &= |\nu_A| \cdot k_c \cdot \tau \\ \frac{1}{c_{A0} - x} - \frac{1}{c_{A0}} &= |\nu_A| \cdot k_c \cdot \tau \\ \frac{1}{1 - \alpha_A} - 1 &= |\nu_A| \cdot k_c \cdot c_{A0} \cdot \tau \end{aligned}$$

Poločas $\tau_{1/2} = \frac{1}{c_{A0} \cdot |\nu_A| \cdot k_c}$

10.3.2 $\nu_A \mathbf{A} + \nu_B \mathbf{B} \rightarrow \text{PRODUKTY}$, $\alpha = \beta = 1$, $c_{A0}/|\nu_A| = c_{B0}/|\nu_B|$

počáteční koncentrace ve *stechiometrickém poměru* $\frac{c_{A0}}{|\nu_A|} = \frac{c_{B0}}{|\nu_B|}$

Bilance:

$$c_A = c_{A0} - |\nu_A| \cdot x = c_{A0} - c_{A0} \cdot \alpha_A$$

$$c_B = c_{B0} - |\nu_B| \cdot x = |\nu_B| \left(\frac{c_{A,0}}{|\nu_A|} - x \right) = \frac{|\nu_B|}{|\nu_A|} (c_{A,0} - |\nu_A| \cdot x) = \frac{|\nu_B|}{|\nu_A|} \cdot c_A$$

$$= c_{B0} - c_{A0} \cdot \alpha_A = \frac{|\nu_B|}{|\nu_A|} \cdot c_{A0} (1 - \alpha_A)$$

Diferenciální rovnice:

$$-\frac{dc_A}{|\nu_A| \cdot d\tau} = -\frac{dc_B}{|\nu_B| \cdot d\tau} = k_c \cdot c_A \cdot c_B =$$

$$= k_c \cdot \left(\frac{|\nu_B|}{|\nu_A|} \right) \cdot c_A^2 = k_c \cdot \left(\frac{|\nu_A|}{|\nu_B|} \right) \cdot c_B^2$$

$$\frac{dx}{d\tau} = |\nu_B| k_c \cdot (c_{A0} - |\nu_A| \cdot x)^2$$

$$= |\nu_A| k_c \cdot (c_{B0} - |\nu_B| \cdot x)^2$$

$$\frac{d\alpha_A}{d\tau} = |\nu_B| k_c \cdot c_{A0} \cdot (1 - \alpha_A)^2 =$$

$$= |\nu_A| k_c \cdot c_{B0} \cdot (1 - \alpha_A)^2$$

Integrální rovnice:

$$\frac{1}{c_A} - \frac{1}{c_{A0}} = |\nu_B| \cdot k_c \cdot \tau$$

$$\frac{1}{c_B} - \frac{1}{c_{B0}} = |\nu_A| \cdot k_c \cdot \tau$$

$$\frac{1}{c_{A0} - |\nu_A| \cdot x} - \frac{1}{c_{A0}} = |\nu_B| \cdot k_c \cdot \tau$$

$$\frac{1}{c_{B0} - |\nu_B| \cdot x} - \frac{1}{c_{B0}} = |\nu_A| \cdot k_c \cdot \tau$$

$$\frac{1}{1 - \alpha_A} - 1 = |\nu_B| \cdot k_c \cdot c_{A0} \cdot \tau =$$

$$= |\nu_A| \cdot k_c \cdot c_{B0} \cdot \tau$$

Poločas:

$$\tau_{1/2} = \frac{1}{|\nu_B| \cdot k_c \cdot c_{A0}} = \frac{1}{|\nu_A| \cdot k_c \cdot c_{B0}}$$

10.3.3 $\nu_A \mathbf{A} + \nu_B \mathbf{B} \rightarrow \text{PRODUKTY}$, $\alpha = \beta = 1$, $c_{A0}/|\nu_A| \neq c_{B0}/|\nu_B|$

počáteční koncentrace v *nestechiometrickém poměru* $\frac{c_{A0}}{|\nu_A|} \neq \frac{c_{B0}}{|\nu_B|}$

bilance:

$$c_A = c_{A0} - |\nu_A| \cdot x = c_{A0} - c_{A0} \cdot \alpha_A$$

(klíčová složka A)

$$c_B = c_{B0} - |\nu_B| \cdot x = c_{B0} - c_{A0} \cdot \alpha_A = c_{B0} - \frac{|\nu_B|}{|\nu_A|} \cdot c_{A0} \cdot \alpha_A$$

Diferenciální rovnice:

$$-\frac{dc_A}{d\tau} = |\nu_A| k_c \cdot c_A \cdot c_B$$

$$-\frac{dc_B}{d\tau} = |\nu_B| k_c \cdot c_A \cdot c_B$$

$$\frac{dx}{d\tau} = k_c \cdot (c_{A0} - |\nu_A| \cdot x) \cdot (c_{B0} - |\nu_B| \cdot x)$$

$$\frac{d\alpha_A}{d\tau} = |\nu_A| \cdot k_c \cdot (1 - \alpha_A) \cdot (c_{B0} - c_{A0} \cdot \frac{|\nu_B|}{|\nu_A|} \cdot \alpha_A)$$

Integrální rovnice:

$$\ln \frac{c_{A0} \cdot c_B}{c_{B0} \cdot c_A} = (|\nu_A| \cdot c_{B0} - |\nu_B| \cdot c_{A0}) \cdot k_c \cdot \tau$$

$$\ln \frac{c_{A0} \cdot (c_{B0} - |\nu_B| \cdot x)}{c_{B0} \cdot (c_{A0} - |\nu_A| \cdot x)} = (|\nu_A| \cdot c_{B0} - |\nu_B| \cdot c_{A0}) \cdot k_c \cdot \tau$$

$$\ln \frac{1 - \alpha_A \cdot \frac{c_{A0} \cdot |\nu_B|}{c_{B0} \cdot |\nu_A|}}{1 - \alpha_A} = (|\nu_A| \cdot c_{B0} - |\nu_B| \cdot c_{A0}) \cdot k_c \cdot \tau$$

Poločas:

(vzhledem k A)

$$\tau_{1/2} = \frac{1}{k_c \cdot (|\nu_A| \cdot c_{B0} - |\nu_B| \cdot c_{A0})} \cdot \ln \left(2 - \frac{c_{A0} \cdot |\nu_B|}{c_{B0} \cdot |\nu_A|} \right)$$

10.4 JEDNOSMĚRNÉ REAKCE n -TĚHO ŘÁDU

10.4.1 $\nu_A \mathbf{A} \rightarrow \text{PRODUKTY}$

Bilance: $c_A = c_{A0} - |\nu_A| x = c_{A0} - c_{A0} \cdot \alpha_A$

Diferenciální rovnice:

$$-\frac{dc_A}{d\tau} = |\nu_A| \cdot k_c \cdot c_A^n$$

$$\frac{dx}{d\tau} = |\nu_A| \cdot k_c \cdot (c_{A0} - x)^n$$

$$\frac{d\alpha_A}{d\tau} = |\nu_A| \cdot k_c \cdot c_{A0}^{n-1} \cdot (1 - \alpha_A)^n$$

Integrální rovnice:

$$c_A^{1-n} - c_{A0}^{1-n} = |\nu_A| \cdot k_c \cdot (n-1) \cdot \tau$$

$$(c_{A0} - x)^{1-n} - c_{A0}^{1-n} = |\nu_A| \cdot k_c \cdot (n-1) \cdot \tau$$

$$(1 - \alpha_A)^{1-n} - 1 = |\nu_A| \cdot k_c \cdot c_{A0}^{n-1} \cdot (n-1) \cdot \tau$$

Poločas

$$\tau_{1/2} = \left[\frac{2^{n-1} - 1}{|\nu_A| (n-1) \cdot k_c} \right] \cdot c_{A0}^{1-n}$$

10.4.2 $\nu_A \mathbf{A} + \nu_B \mathbf{B} \rightarrow \text{PRODUKTY}$, $n = \alpha + \beta$, $\alpha \neq \beta$

počáteční koncentrace ve *stechiometrickém poměru* $\frac{c_{A0}}{|\nu_A|} = \frac{c_{B0}}{|\nu_B|}$

Bilance:

$$c_A = c_{A0} - |\nu_A| x = c_{A0} - c_{A0} \cdot \alpha_A$$

$$c_B = c_{B0} - |\nu_B| x = |\nu_B| \left(\frac{c_{A0}}{|\nu_A|} - x \right) = \frac{|\nu_B|}{|\nu_A|} (c_{A0} - |\nu_A| x) = \frac{|\nu_B|}{|\nu_A|} \cdot c_A$$

$$= c_{B0} - c_{A0} \cdot \alpha_A = \frac{|\nu_B|}{|\nu_A|} \cdot c_{A0} (1 - \alpha_A)$$

Diferenciální rovnice:

$$\begin{aligned} -\frac{dc_A}{|\nu_A| \cdot d\tau} &= -\frac{dc_B}{|\nu_B| \cdot d\tau} = k_c \cdot c_A^\alpha \cdot c_B^\beta = \\ &= k_c \cdot \left(\frac{|\nu_B|}{|\nu_A|} \right)^\alpha \cdot c_A^n = k_c \cdot \left(\frac{|\nu_A|}{|\nu_B|} \right)^\beta \cdot c_B^n \end{aligned}$$

$$\frac{dx}{d\tau} = k_c \cdot \left(\frac{|\nu_B|}{|\nu_A|} \right)^\beta \cdot (c_{A0} - |\nu_A| x)^n$$

$$= k_c \cdot \left(\frac{|\nu_A|}{|\nu_B|} \right)^\alpha \cdot (c_{B0} - |\nu_B| x)^n$$

$$\frac{d\alpha_A}{d\tau} = k_c \cdot \left(\frac{|\nu_B|^\beta}{|\nu_A|^{\beta-1}} \right) \cdot c_{A0}^{n-1} \cdot (1 - \alpha_A)^n$$

$$= k_c \cdot \left(\frac{|\nu_A|^\alpha}{|\nu_B|^{\alpha-1}} \right) \cdot c_{B0}^{n-1} \cdot (1 - \alpha_A)^n$$

Integrální rovnice:

$$c_A^{1-n} - c_{A0}^{1-n} = k_c \left(\frac{|\nu_B|}{|\nu_A|} \right)^\beta \cdot (n-1) \cdot \tau$$

$$c_B^{1-n} - c_{B0}^{1-n} = k_c \left(\frac{|\nu_A|}{|\nu_B|} \right)^\alpha \cdot (n-1) \cdot \tau$$

$$(c_{A0} - |\nu_A| x)^{1-n} - c_{A0}^{1-n} = k_c \left(\frac{|\nu_B|}{|\nu_A|} \right)^\beta \cdot (n-1) \cdot \tau$$

$$(c_{B0} - |\nu_B| x)^{1-n} - c_{B0}^{1-n} = k_c \left(\frac{|\nu_A|}{|\nu_B|} \right)^\alpha \cdot (n-1) \cdot \tau$$

$$(1 - \alpha_A)^{1-n} - 1 = k_c \cdot \left(\frac{|\nu_B|^\beta}{|\nu_A|^{\beta-1}} \right) \cdot (n-1) \cdot c_{A0}^{n-1} \cdot \tau$$

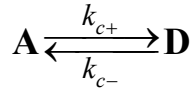
$$= k_c \cdot \left(\frac{|\nu_A|^\alpha}{|\nu_B|^{\alpha-1}} \right) \cdot (n-1) \cdot c_{B0}^{n-1} \cdot \tau$$

Poločas:

$$\tau_{1/2} = \frac{|\nu_A|^{\beta-1} \cdot (2^{n-1} - 1)}{|\nu_B|^\beta \cdot k_c \cdot (n-1)} \cdot c_{A0}^{1-n} = \frac{|\nu_B|^{\alpha-1} \cdot (2^{n-1} - 1)}{|\nu_A|^\alpha \cdot k_c \cdot (n-1)} \cdot c_{B0}^{1-n}$$

10.5 PROTISMĚRNÉ REAKCE

10.5.1 REAKCE OBOUSTRANNĚ PRVÉHO ŘÁDU



Bilance: $c_A = c_{A0} - x = c_{A0} - c_{A0} \cdot \alpha_A$
 $c_D = c_{D0} + x = c_{D0} + c_{A0} \cdot \alpha_A$

Diferenciální rovnice:

$$-\frac{dc_A}{d\tau} = +\frac{dc_D}{d\tau} = k_{c+} \cdot c_A - k_{c-} \cdot c_D$$

$$\frac{dx}{d\tau} = k_{c+} \cdot (c_{A0} - x) - k_{c-} \cdot (c_{D0} + x)$$

$$\frac{d\alpha_A}{d\tau} = k_{c+} \cdot (1 - \alpha_A) - k_{c-} \cdot \left(\frac{c_{D0}}{c_{A0}} + \alpha_A \right)$$

Rovnováha:

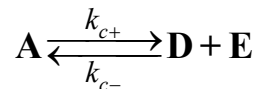
$$K_c = \frac{c_{Drov}}{c_{Arov}} = \frac{c_{D0} + x_{rov}}{c_{A0} - x_{rov}} = \frac{c_{D0} + c_{A0} \cdot \alpha_{Arov}}{c_{A0}(1 - \alpha_{Arov})}$$

Integrální rovnice:

$$\ln \frac{c_{A0} \cdot K_c - c_{D0}}{c_{A0} \cdot K_c - c_{D0} - x \cdot (K_c + 1)} = k_{c+} \cdot \frac{K_c + 1}{K_c} \cdot \tau$$

$$\ln \frac{c_{A0} \cdot K_c - c_{D0}}{c_{A0} \cdot K_c - c_{D0} - \alpha \cdot c_{A0} \cdot (K_c + 1)} = k_{c+} \cdot \frac{K_c + 1}{K_c} \cdot \tau$$

10.5.2 PŘÍMÁ REAKCE PRVÉHO ŘÁDU, ZPĚTNÁ DRUHÉHO ŘÁDU



Bilance: $c_A = c_{A0} - x = c_{A0} - c_{A0} \cdot \alpha_A$, $c_D = c_{D0} + x = c_{D0} + c_{A0} \cdot \alpha_A$
 $c_E = c_{E0} + x = c_{E0} + c_{A0} \cdot \alpha_A$

Diferenciální rovnice:

$$-\frac{dc_A}{d\tau} = +\frac{dc_D}{d\tau} = +\frac{dc_E}{d\tau} = k_{c+} \cdot c_A - k_{c-} \cdot c_D \cdot c_E$$

$$\frac{dx}{d\tau} = k_{c+} \cdot (c_{A0} - x) - k_{c-} \cdot (c_{D0} + x) \cdot (c_{E0} + x)$$

$$\frac{d\alpha_A}{d\tau} = k_{c+} \cdot (1 - \alpha_A) +$$

$$-k_{c-} \cdot c_{A0} \cdot \left(\frac{c_{D0}}{c_{A0}} + \alpha_A \right) \cdot \left(\frac{c_{E0}}{c_{A0}} + \alpha_A \right)$$

Integrální rovnice:

$$\ln \frac{(1-M) \cdot [N \cdot (1+M) + x]}{(1+M) \cdot [N \cdot (1-M) + x]} = k_{c+} \cdot \frac{2 \cdot M \cdot N}{K_c} \cdot \tau$$

$$\ln \frac{(1-M) \cdot [N \cdot (1+M) + c_{A0} \cdot \alpha_A]}{(1+M) \cdot [N \cdot (1-M) + c_{A0} \cdot \alpha_A]} = k_{c+} \cdot \frac{2 \cdot M \cdot N}{K_c} \cdot \tau$$

kde $M = \left[1 + \frac{c_{A0} \cdot K_c - c_{D0} \cdot c_{E0}}{N^2} \right]^{1/2}$
 $N = \frac{1}{2} (K_c + c_{D0} + c_{E0})$

Rovnováha:

$$K_c = \frac{c_{Drov} \cdot c_{Erov}}{c_{Arov}} = \frac{(c_{D0} + x_{Arov}) \cdot (c_{E0} + x_{Arov})}{c_{A0} - x_{Arov}} = \frac{(c_{D0} + c_{A0} \cdot \alpha_{Arov}) \cdot (c_{E0} + c_{A0} \cdot \alpha_{Arov})}{c_{A0}(1 - \alpha_{Arov})}$$

10.5.3 PŘÍMÁ REAKCE DRUHÉHO ŘÁDU, ZPĚTNÁ PRVÉHO ŘÁDU $A + B \xrightleftharpoons[k_{c-}]{k_{c+}} D$

Bilance: $c_A = c_{A0} - x = c_{A0} - c_{A0} \cdot \alpha_A$, $c_D = c_{D0} + x = c_{D0} + c_{A0} \cdot \alpha_A$
 $c_B = c_{B0} - x = c_{B0} - c_{A0} \cdot \alpha_A$

Diferenciální rovnice:

$$-\frac{dc_A}{d\tau} = -\frac{dc_B}{d\tau} = +\frac{dc_D}{d\tau} = k_{c+} \cdot c_A \cdot c_B - k_{c-} \cdot c_D$$

$$\frac{dx}{d\tau} = k_{c+} \cdot (c_{A0} - x) \cdot (c_{B0} - x) - k_{c-} \cdot (c_{D0} + x)$$

$$\frac{d\alpha_A}{d\tau} = k_{c+} \cdot c_{A0} \cdot (1 - \alpha_A) \cdot \left(\frac{c_{B0}}{c_{A0}} + \alpha_A \right) +$$

$$- k_{c-} \cdot \left(\frac{c_{D0}}{c_{A0}} + \alpha_A \right)$$

Integrální rovnice:

$$\ln \frac{(1-M) \cdot [N \cdot (1+M) - x]}{(1+M) \cdot [N \cdot (1-M) - x]} = k_{c+} \cdot 2 \cdot M \cdot N \cdot \tau$$

$$\ln \frac{(1-M) \cdot [N \cdot (1+M) - c_{A0} \cdot \alpha_A]}{(1+M) \cdot [N \cdot (1-M) - c_{A0} \cdot \alpha_A]} = k_{c+} \cdot 2 \cdot M \cdot N \cdot \tau$$

kde $M = \left[1 + \frac{c_{D0} - K_c \cdot c_{A0} \cdot c_{B0}}{K_c \cdot N^2} \right]^{1/2}$
 $N = \frac{1 + K_c \cdot (c_{A0} + c_{B0})}{2 K_c}$

Rovnováha:

$$K_c = \frac{c_{Drov}}{c_{Arov} \cdot c_{Brov}} = \frac{(c_{D0} + x_{Arov})}{(c_{A0} - x_{Arov}) \cdot (c_{B0} - x_{Arov})} = \frac{(c_{D0} + c_{A0} \cdot \alpha_{Arov})}{c_{A0}(1 - \alpha_{Arov}) \cdot (c_{B0} + c_{A0} \cdot \alpha_{Arov})}$$

10.5.4 PŘÍMÁ I ZPĚTNÁ REAKCE DRUHÉHO ŘÁDU $A + B \xrightleftharpoons[k_{c-}]{k_{c+}} D + E$

Bilance: $c_A = c_{A0} - x = c_{A0} - c_{A0} \cdot \alpha_A$, $c_D = c_{D0} + x = c_{D0} + c_{A0} \cdot \alpha_A$
 $c_B = c_{B0} - x = c_{B0} - c_{A0} \cdot \alpha_A$, $c_E = c_{E0} + x = c_{E0} + c_{A0} \cdot \alpha_A$

Diferenciální rovnice:

$$-\frac{dc_A}{d\tau} = -\frac{dc_B}{d\tau} = +\frac{dc_D}{d\tau} = +\frac{dc_E}{d\tau} =$$

$$= k_{c+} \cdot c_A \cdot c_B - k_{c-} \cdot c_D \cdot c_E$$

$$\frac{dx}{d\tau} = k_{c+} \cdot (c_{A0} - x)(c_{B0} - x) - k_{c-} \cdot (c_{D0} + x)(c_{E0} + x)$$

$$\frac{d\alpha_A}{d\tau} = k_{c+} \cdot c_{A0} \cdot (1 - \alpha_A) \cdot \left(\frac{c_{B0}}{c_{A0}} - \alpha_A \right) +$$

$$- k_{c-} \cdot c_{A0} \cdot \left(\frac{c_{D0}}{c_{A0}} + \alpha_A \right) \cdot \left(\frac{c_{E0}}{c_{A0}} + \alpha_A \right)$$

Integrální rovnice:

$$\ln \frac{(1-M) \cdot [N \cdot (1+M) - x]}{(1+M) \cdot [N \cdot (1-M) - x]} = k_{c+} \cdot 2 \cdot M \cdot N \cdot \frac{K_c - 1}{K_c} \cdot \tau$$

$$\ln \frac{(1-M) \cdot [N(1+M) - c_{A0} \cdot \alpha_A]}{(1+M) \cdot [N(1-M) - c_{A0} \cdot \alpha_A]} = k_{c+} \cdot 2M \cdot N \cdot \frac{K_c - 1}{K_c} \cdot \tau$$

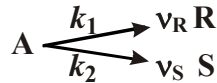
kde $M = \left[1 + \frac{c_{D0} \cdot c_{E0} - K_c \cdot c_{A0} \cdot c_{B0}}{(K_c - 1) \cdot N^2} \right]^{1/2}$
 $N = \frac{K_c \cdot (c_{A0} + c_{B0}) + c_{D0} + c_{E0}}{2(K_c - 1)}$

Rovnováha:

$$K_c = \frac{c_{Drov} \cdot c_{Erov}}{c_{Arov} \cdot c_{Brov}} = \frac{(c_{D0} + x_{rov}) \cdot (c_{E0} - x_{rov})}{(c_{A0} - x_{rov}) \cdot (c_{B0} - x_{rov})} = \frac{(c_{D0} + c_{A0} \cdot \alpha_{Arov}) \cdot (c_{E0} + c_{A0} \cdot \alpha_{Arov})}{c_{A0}(1 - \alpha_{Arov}) \cdot (c_{B0} - c_{A0} \cdot \alpha_{Arov})}$$

10.6 BOČNÉ REAKCE

10.6.1 ROZVĚTVENÉ REAKCE PRVÉHO ŘÁDU



Bilance: $c_A = c_{A0} - x_1 - x_2$, $c_R = c_{R0} + \nu_R x_1$ $d c_R = \nu_R \cdot d x_1$
 $c_S = c_{S0} + \nu_S x_2$ $d c_S = \nu_S \cdot d x_2$

Diferenciální rovnice:

$$-\frac{dc_A}{d\tau} = (k_1 + k_2) \cdot c_A$$

$$\frac{dc_R}{\nu_R \cdot d\tau} = k_1 \cdot c_A$$

$$\frac{dc_S}{\nu_S \cdot d\tau} = k_2 \cdot c_A$$

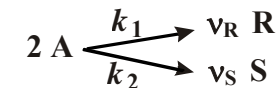
Integrální rovnice:

$$c_A = c_{A0} \cdot e^{-(k_1+k_2)\tau}$$

$$c_R = c_{R0} + \frac{\nu_R \cdot k_1 \cdot c_{A0}}{k_1 + k_2} \cdot (1 - e^{-(k_1+k_2)\tau})$$

$$c_S = c_{S0} + \frac{\nu_S \cdot k_2 \cdot c_{A0}}{k_1 + k_2} \cdot (1 - e^{-(k_1+k_2)\tau})$$

10.6.2 ROZVĚTVENÉ REAKCE DRUHÉHO ŘÁDU



Bilance: $c_A = c_{A0} - 2 x_1 - 2 x_2$, $c_R = c_{R0} + \nu_R x_1$ $d c_R = \nu_R \cdot d x_1$
 $c_S = c_{S0} + \nu_S x_2$ $d c_S = \nu_S \cdot d x_2$

Diferenciální rovnice:

$$-\frac{dc_A}{2 d\tau} = (k_1 + k_2) \cdot c_A^2$$

$$+\frac{dc_R}{\nu_R \cdot d\tau} = k_1 \cdot c_A^2$$

$$+\frac{dc_S}{\nu_S \cdot d\tau} = k_2 \cdot c_A^2$$

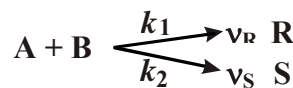
Integrální rovnice:

$$\frac{1}{c_A} - \frac{1}{c_{A0}} = 2(k_1 + k_2) \cdot \tau \quad , \quad c_A = \frac{c_{A0}}{1 + 2 c_{A0} \cdot (k_1 + k_2) \cdot \tau}$$

$$c_R = c_{R0} + \frac{\nu_R \cdot k_1 \cdot c_{A0}^2 \cdot \tau}{1 + 2 \cdot c_{A0} \cdot (k_1 + k_2) \cdot \tau}$$

$$c_S = c_{S0} + \frac{\nu_S \cdot k_2 \cdot c_{A0}^2 \cdot \tau}{1 + 2 \cdot c_{A0} \cdot (k_1 + k_2) \cdot \tau}$$

10.6.3 ROZVĚTVENÉ REAKCE DRUHÉHO ŘÁDU



Bilance: $c_A = c_{A0} - x_1 - x_2$, $c_R = c_{R0} + \nu_R x_1$ $d c_R = \nu_R \cdot d x_1$
 $c_B = c_{B0} - x_1 - x_2$, $c_S = c_{S0} + \nu_S x_2$ $d c_S = \nu_S \cdot d x_2$

Diferenciální rovnice:

$$-\frac{dc_A}{d\tau} = -\frac{dc_B}{d\tau} = (k_1 + k_2) \cdot c_A \cdot c_B$$

$$\frac{dc_R}{\nu_R \cdot d\tau} = k_1 \cdot c_A \cdot c_B$$

$$\frac{dc_S}{\nu_S \cdot d\tau} = k_2 \cdot c_A \cdot c_B$$

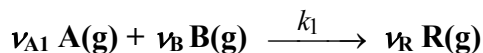
Integrální rovnice:

$$\ln \frac{c_{A0} \cdot c_B}{c_{B0} \cdot c_A} = (k_1 + k_2) \cdot (c_{B0} - c_{A0}) \cdot \tau$$

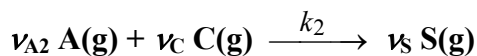
$$c_R = c_{R0} + \frac{\nu_R \cdot k_1 \cdot c_{A0}}{(k_1 + k_2)} \cdot \frac{(1 - e^{(k_1+k_2)(c_{B0}-c_{A0})\tau})}{(c_{A0} - c_{B0}) \cdot e^{(k_1+k_2)(c_{B0}-c_{A0})\tau}}$$

$$c_S = c_{S0} + \frac{\nu_S \cdot k_2 \cdot c_{A0}}{(k_1 + k_2)} \cdot \frac{(1 - e^{(k_1+k_2)(c_{B0}-c_{A0})\tau})}{(c_{A0} - c_{B0}) \cdot e^{(k_1+k_2)(c_{B0}-c_{A0})\tau}}$$

10.6.4 KONKURENČNÍ BOČNÉ REAKCE



α_1 -řád vzhledem k A, β -vzhledem k B



α_2 -řád vzhledem k A, γ -vzhledem k C

Bilance:

$$c_A = c_{A0} + \nu_{A1} x_1 + \nu_{A2} x_2$$

$$c_B = c_{B0} + \nu_B x_1$$

$$c_C = c_{C0} + \nu_C x_2$$

$$c_R = c_{R0} + \nu_R x_1$$

$$c_S = c_{S0} + \nu_S x_2$$

Diferenciální rovnice:

$$\frac{dc_A}{\nu_A d\tau} = k_1 \cdot c_A^{\alpha_1} \cdot c_B^\beta + k_2 \cdot c_A^{\alpha_2} \cdot c_C^\gamma$$

$$\frac{dc_R}{\nu_R d\tau} = \frac{dc_B}{\nu_B d\tau} = k_1 \cdot c_A^{\alpha_1} \cdot c_B^\beta$$

$$\frac{dc_S}{\nu_S d\tau} = \frac{dc_C}{\nu_C d\tau} = k_2 \cdot c_A^{\alpha_2} \cdot c_C^\gamma$$

$$\frac{d c_R}{d c_S} = \frac{k_1}{k_2} \cdot \frac{\nu_R}{\nu_S} c_A^{(\alpha_1 - \alpha_2)} \cdot \frac{c_B^\beta}{c_C^\gamma}$$

$$\frac{d x_1}{d x_2} = \frac{k_1}{k_2} \cdot (c_{A0} + \nu_{A1} \cdot x_1 + \nu_{A1} \cdot x_2)^{(\alpha_1 - \alpha_2)} \cdot \frac{(c_{B0} + \nu_B \cdot x_1)^\beta}{(c_{C0} + \nu_C \cdot x_2)^\gamma}$$

Integrální rovnice:
(pro speciální případy)

$$\alpha_1 = \alpha_2 \text{ a } \beta = \gamma = 1$$

$$\ln \frac{c_B - \nu_B \cdot x_1}{c_{B0}} = \frac{k_1}{k_2} \cdot \frac{\nu_B}{\nu_C} \cdot \ln \frac{c_{C0} - x_2}{c_{C0}}$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 \text{ a } \beta = 1, \gamma = 2$$

$$\ln \frac{c_{B0} + \nu_B \cdot x_1}{c_{B0}} = \frac{k_1}{k_2} \cdot \frac{\nu_B \cdot \nu_C \cdot x_2}{c_{C0} \cdot (c_{C0} + \nu_C \cdot x_2)}$$

10.7 NÁSLEDNÉ REAKCE $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$

10.7.1 REAKCE PRVÉHO ŘÁDU, $k_1 \neq k_2$

Diferenciální rovnice:

$$-\frac{dc_A}{d\tau} = k_1 \cdot c_A$$

$$\frac{dc_B}{d\tau} = k_1 \cdot c_A - k_2 \cdot c_B$$

$$\frac{dc_C}{d\tau} = k_2 \cdot c_B \quad c_C = c_{A0} + c_{B0} + c_{C0} - c_A - c_B$$

Integrální rovnice:

$$c_A = c_{A0} \cdot e^{-k_1 \cdot \tau}$$

$$c_B = c_{B0} \cdot e^{-k_2 \cdot \tau} + \frac{c_{A0} \cdot k_1}{k_2 - k_1} \cdot (e^{-k_1 \cdot \tau} - e^{-k_2 \cdot \tau})$$

$$\tau_{\max} = \frac{1}{k_2 - k_1} \cdot \ln \frac{k_1 \cdot k_2 \cdot (c_{A0} + c_{B0}) - k_2^2 \cdot c_{B0}}{k_1^2 \cdot c_{A0}}$$

$$c_{B0} = 0: \quad \tau_{\max} = \frac{\ln(k_2/k_1)}{k_2 - k_1}, \quad c_{B\max} = c_{A0} \left(\frac{k_1}{k_2}\right)^{\frac{k_1}{k_2 - k_1}}$$

$$c_C = c_{C0} + c_{B0} (1 - e^{-k_2 \cdot \tau}) + c_{A0} \left(1 + \frac{e^{-k_1 \cdot \tau} - e^{-k_2 \cdot \tau}}{k_2 - k_1}\right)$$

10.7.2 REAKCE PRVÉHO ŘÁDU, $k_1 \gg k_2$,

Řídící děj $B \rightarrow C$

$$c_A \rightarrow 0$$

$$c_B = (c_{A0} + c_{B0}) e^{-k_2 \cdot \tau}$$

$$c_C = c_{C0} + (c_{A0} + c_{B0}) \cdot (1 - e^{-k_2 \cdot \tau})$$

10.7.3 REAKCE PRVÉHO ŘÁDU, $k_1 \ll k_2$

Řídící děj $A \rightarrow B$

$$c_A = c_{A0} \cdot e^{-k_1 \cdot \tau}$$

$$c_B = c_{A0} \cdot \frac{k_1}{k_2} \cdot e^{-k_1 \cdot \tau}$$

$$c_C = c_{C0} + c_{B0} + c_{A0} \cdot (1 - e^{-k_1 \cdot \tau})$$

10.7.4 REAKCE PRVÉHO ŘÁDU, $k_1 = k_2$

Diferenciální rovnice:

$$-\frac{dc_A}{d\tau} = k \cdot c_A$$

$$\frac{dc_B}{d\tau} = k \cdot (c_A - c_B)$$

$$\frac{dc_C}{d\tau} = k \cdot c_B$$

Integrální rovnice:

$$c_A = c_{A0} \cdot e^{-k \cdot \tau}$$

$$c_B = e^{-k \cdot \tau} \cdot (c_{B0} + k \cdot c_{A0} \cdot \tau)$$

$$\tau_{\max} = \frac{c_{A0} - c_{B0}}{k \cdot c_{A0}} \quad ; \quad c_{B\max} = c_{A0} \cdot \exp\left(\frac{c_{B0} - c_{A0}}{c_{A0}}\right)$$

$$c_{B0} = 0: \quad \tau_{\max} = \frac{1}{k} \quad , \quad c_{B\max} = c_{A0} \cdot \exp(-1)$$

$$c_C = c_{A0} + c_{B0} + c_{C0} - c_A - c_B$$

$$c_C = c_{C0} + c_{A0} (1 - (1 + k \cdot \tau) \cdot e^{-k \cdot \tau}) + c_{B0} (1 - e^{-k \cdot \tau})$$