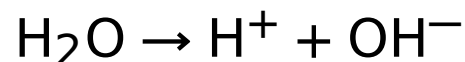


Příklad na závislost K na teplotě

1/17
AB15

Iontový součin vody K_w je rovnovážná konstanta reakce

$$pK = -\log_{10} K$$



Pro ionty se používá standardní stav nekonečného zředění, $c^{\text{st}} = 1 \text{ mol L}^{-1}$. Podle tabulek je $pK_w(0^\circ\text{C}) = 14.95$ a $pK_w(50^\circ\text{C}) = 13.26$. Vypočtete reakční entalpii a srovnajte s tabulkovou hodnotou neutralizačního tepla (silné kyseliny se silnou bází) $-57.6 \text{ kJ mol}^{-1}$ (25°C).

$$\frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta_r H_m^\ominus}{RT^2}$$

Za předpokladu konstantní reakční entalpie integrujeme

$$\ln K_2 - \ln K_1 = \frac{\Delta_r H_m^\ominus}{R} \left[-\frac{1}{T_2} + \frac{1}{T_1} \right]$$

$$\begin{aligned} \Delta_r H_m^\ominus &= R \frac{\ln K_2 - \ln K_1}{1/T_1 - 1/T_2} = R \frac{\ln 10(pK_1 - pK_2)}{1/T_1 - 1/T_2} = 8.3145 \cdot \ln 10 \cdot \frac{14.95 - 13.26}{1/273.15 - 1/323.15} \text{ J mol}^{-1} \\ &= 57118 \text{ J mol}^{-1} \end{aligned}$$

$$\underline{\Delta_r H_m^\ominus = 57.1 \text{ kJ mol}^{-1}} \approx -\text{neutralizační teplo} = 57.6 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Zanedbali jsme změnu objemu roztoku s teplotou, správně by se mělo pracovat s molalitami.

Pokud $q_i = \text{const} \cdot n_i$, pak můžeme používat q_i místo n_i .

● $c_i = n_i/V$ pokud $V = \text{const}$ (plyny, přibližně roztoky při $p = \text{const}$)

● $p_i = n_i \frac{RT}{V}$ pro směs ideálních plynů za $V = \text{const}$

Příklad. Reakce (Haberův–Boschův proces)



probíhá za konstantního objemu a teploty. Na začátku je ve směsi 40 mol. % N_2 a 60 mol. % H_2 za tlaku 10 MPa. Jaká je hodnota K , jestliže tlak po ustavení rovnováhy byl 7.6 MPa? ($p^{\text{st}} = 0.1 \text{ MPa}$)?

i	$p_{i,0}$ [MPa]	$p_i(\Delta p)$ [MPa]
N_2	4	$4 - \Delta p$
H_2	6	$6 - 3\Delta p$
NH_3	0	$2\Delta p$
celkem	10	$10 - 2\Delta p$

$$10 - 2\Delta p = 7.6 \Rightarrow \Delta p = 1.2 \text{ [MPa]}$$

$$K = \frac{(p_{\text{NH}_3}/p^{\text{st}})^2}{(p_{\text{N}_2}/p^{\text{st}})(p_{\text{H}_2}/p^{\text{st}})^3}$$

$$= \frac{[(2 \cdot 1.2/0.1)^2]}{[(4 - 1.2)/0.1] \cdot [(6 - 3 \cdot 1.2)/0.1]^3} = \underline{0.0015}$$

Vzhledem k neidealitě plynů a odčítání blízkých čísel ($\Delta p = (10 - 7.6)/2$) bude nepřesné

Plyny:

- Pro plyny používáme standardní stav „ideální plyn za dané teploty a standardního tlaku“. Tento standardní stav nezávisí na tlaku.
- Za nepříliš vysokých tlaků nebo menších požadavků na přesnost stačí aproximace ideálním plynem.

Kondenzované fáze:

- Pro kapalinu a pevnou látku používáme standardní stav „čistá látka za dané teploty a daného tlaku“. Tento standardní stav závisí na tlaku (za běžných tlaků málo).
- Na tlaku závisí i K pro reakce s čistými kondenzovanými fázemi, ale s výjimkou velmi vysokých tlaků lze tuto závislost zanedbat a použít tabulkovou hodnotu za p^{st} .
- Proto pro čisté látky v kondenzované fázi použijeme $a_i = 1$.

Oxid uhelnatý se vede potrubím, v němž se udržuje teplota 1300 K a tlak 202 kPa. Přitom může probíhat reakce

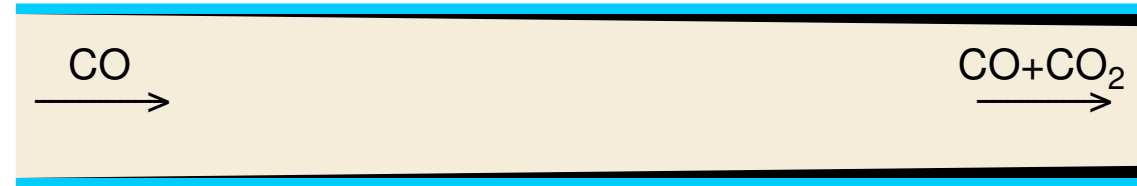


a) Kolik gramů sazí vznikne z 1 mol přiváděného plynu?

b) Kolik musíme přidat CO_2 k 1 mol CO , aby nedošlo k tvorbě sazí?

Data: $K = 0.00515$ ($p^{\text{st}} = 101 \text{ kPa}$).

i	$n_{i,0}$	n_i [mol]
CO (g)	1	$1 - 2\xi$
CO ₂ (g)	0	ξ
C (s)	0	ξ (není plyn)
$n^{(\text{g})}$	1	$1 - \xi$



a)

$$K = \frac{a_{\text{CO}_2} a_{\text{C}}}{a_{\text{CO}}^2} = \frac{\left(\frac{\xi}{1 - \xi} p_{\text{rel}} \right) \cdot 1}{\left(\frac{1 - 2\xi}{1 - \xi} p_{\text{rel}} \right)^2} \Rightarrow \xi = 0.0100 \text{ [mol]}$$

$p_{\text{rel}} = p/p^{\text{st}}$

$$m_{\text{C}} = M(\text{C}) \cdot \xi = \underline{0.12 \text{ g na mol CO}}$$

b) poměr $\text{CO}_2 : \text{CO} = \xi/(1 - 2\xi) = \underline{0.0102}$

Při rozkladu čisté pevné látky (příp. kapaliny) uniká plyn (plyny).
Popis je podobný jako u varu nebo sublimace.

Rozkladná teplota: $\sum_{i \in \text{plyny}} p_i = p$, normální rozkladná teplota: $\sum_{i \in \text{plyny}} p_i = p^{\text{st}}$

● $K(T)$ roste s T , protože $\Delta_r H > 0$ (jako u varu nebo sublimace)

● $\Delta_r H < 0$ (exotermická rozkladná reakce) = exploze

Příklad.



$$K = \frac{a_{\text{CaO}} a_{\text{CO}_2}}{a_{\text{CaCO}_3}} = a_{\text{CO}_2} = \frac{p_{\text{CO}_2}}{p^{\text{st}}}$$

rozkladná teplota: $p_{\text{CO}_2} = p^{\text{st}} \Rightarrow K(T_{\text{rozkl}}) = 1$

Do autoklávu o objemu 1 dm^3 vložíme jeden gram pevného chloridu amonného ($M = 53.5 \text{ g mol}^{-1}$), evakuujeme a uzavřeme. Poté nádobu vytemperujeme na teplotu 600 K . Jaký bude tlak uvnitř nádoby? Rovnovážná konstanta disociace NH_4Cl při 600 K je 0.0836 ($p^{\text{st}} = 1 \text{ atm}$).



Bilance: $p = p_{\text{HCl}} + p_{\text{NH}_3} \Rightarrow p_{\text{HCl}} = p_{\text{NH}_3} = p/2$

$$K = \frac{a_{\text{NH}_3} a_{\text{HCl}}}{a_{\text{NH}_4\text{Cl}}} = \frac{p_{\text{NH}_3} p_{\text{HCl}}}{p^{\text{st}} p^{\text{st}}} = \left(\frac{p/2}{p^{\text{st}}} \right)^2$$

$$p = 2p^{\text{st}} \sqrt{K} = 2 \cdot \sqrt{0.0836} \text{ atm} = 58.6 \text{ kPa}$$

Poznámky:

1. Ve skutečnosti je v parách malé množství molekul NH_4Cl .
2. Předpokládali jsme, že v autoklávu zůstala nevysublimovaná část pevného salmiaku. Ověření:

$$n_{\text{NH}_3+\text{HCl}}(\text{g}) = \frac{pV}{RT} = 0.011745 \text{ mol}, \quad m_{(\text{g})} = n_{\text{NH}_3+\text{HCl}}(\text{g}) \bar{M} = n_{\text{NH}_3+\text{HCl}}(\text{g}) \frac{M(\text{NH}_4\text{Cl})}{2} = 0.314 \text{ g},$$

což je méně než navážka 1 g

3. Zanedbali jsme objem pevného NH_4Cl .

Budeme uvažovat jednu reakci mezi čistými kondenzovanými fázemi. Rovnováha:

$$K = \prod_{i=1}^k a_i^{\nu_i}, \quad a_i = 1 \Rightarrow K = 1 \Rightarrow \Delta_r G_m = \Delta_r G_m^\ominus = 0$$

- pokud $\Delta_r G_m^\ominus \neq 0$, dojde k rovnováze v krajních bodech intervalu – jedna z látek vymizí
- pokud $\Delta_r G_m^\ominus = 0$ (pro určitou teplotu), je více fází v rovnováze (jejich množství nelze určit)

K	$\Delta_r G_m^\ominus$	$G(\xi)$	$\xi_{\text{rovnováha}}$
< 1	> 0	roste	ξ_{min}
$= 1$	$= 0$	konstanta	$[\xi_{\text{min}}, \xi_{\text{max}}]$
> 1	< 0	klesá	ξ_{max}



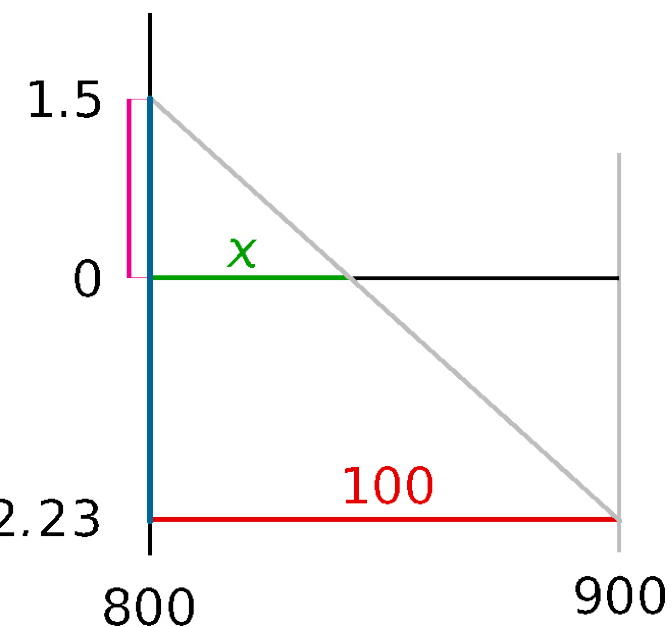
Při jaké teplotě mohou spolu koexistovat tři pevné fáze Fe, FeO a Fe₃O₄? Určete rovnovážný stav systému při teplotách 800 K a 900 K, jsou-li na počátku dva moly Fe₃O₄ a tři moly Fe. Data:

látka	$\Delta_{\text{sl}}G_m^\ominus(800\text{ K})/(\text{kJ mol}^{-1})$	$\Delta_{\text{sl}}G_m^\ominus(900\text{ K})/(\text{kJ mol}^{-1})$	$n_{i,0}$	$n_i [\text{mol}]$
Fe ₃ O ₄ (s)	-848.54	-818.45	2	2 - ξ
Fe (s)	0	0	3	3 - ξ
FeO (s)	-211.76	-205.17	0	4 ξ

800 K: $\Delta_r G_m^\ominus = 4 \cdot (-211.76) - (-848.54) = 1.5 [\text{kJ mol}^{-1}]$
 směr: $\leftarrow \xi = \xi_{\text{min}} = 0$ (nemůže reagovat), 2 mol Fe₃O₄ + 3 mol Fe

900 K: $\Delta_r G_m^\ominus = 4 \cdot (-205.17) - (-818.45) = -2.23 [\text{kJ mol}^{-1}]$
 směr: \rightarrow , $\xi = \xi_{\text{max}} = 2$ (Fe₃O₄ vymizí), 1 mol Fe, 8 mol FeO

Rovnováha: $\Delta_r G_m^\ominus(T) = 0$, $T = 800 + 100 \cdot \frac{1.5}{1.5 - (-2.23)} = 800 + 40 [\text{K}]$
 $T = 840 [\text{K}]$



Ukázka: vliv neideálního chování (Lewis–Randall)

Vypočtete rovnovážné složení reakce $N_2 + 3H_2 \rightarrow 2NH_3$ za teploty 600 K a tlaku 10 MPa, je-li vstupní směs stechiometrická. Rovnovážná konstanta je za těchto podmínek rovna $K = 0.001703$.

i	$n_{i,0}(\xi)$	n_i
N_2	1	$1 - \xi$
H_2	3	$3 - 3\xi$
NH_3	0	2ξ
celkem	4	$4 - 2\xi$

aproximace fugacitních koeficientů: Lewisovo–Randallovo pravidlo

Pro $i \in \{N_2, H_2, NH_3\}$ a dané T, p :

1) objem $V_{i,m}$ z Redlichovy–Kwongovy rovnice (čistá látka)

2) fugacitní koeficient: (viz **fchab10**)

$$\varphi_i = \frac{RT}{p(V_{i,m} - b_i)} \exp \left[\frac{a_i}{RT^{3/2}b_i} \ln \frac{V_{i,m}}{V_{i,m} + b} + z_i - 1 \right]$$

$$\Rightarrow \varphi_{NH_3} = 0.915, \varphi_{N_2} = 1.030, \varphi_{H_2} = 1.035$$

Rovnici pro rovnováhu řešíme za pomoci softwaru (např. Maple):

$$K = \frac{a_{NH_3}^2}{a_{H_2}^3 a_{N_2}} \Rightarrow \underline{\xi = 0.6289} \quad (\xi_{id. plyn} = 0.6035)$$

$$\Rightarrow x_{N_2} = \underline{0.135}, x_{H_2} = \underline{0.406}, x_{NH_3} = \underline{0.459}$$

id. plyn: $x_{N_2} = 0.142, x_{H_2} = 0.426, x_{NH_3} = 0.432$

viz aplikace

$$a_{N_2} = \frac{p\varphi_{N_2}}{p^{st}} \cdot \frac{1 - \xi}{4 - 2\xi}$$

$$a_{H_2} = \frac{p\varphi_{H_2}}{p^{st}} \cdot \frac{3 - 3\xi}{4 - 2\xi}$$

$$a_{NH_3} = \frac{p\varphi_{NH_3}}{p^{st}} \cdot \frac{2\xi}{4 - 2\xi}$$

Použijeme Redlichovou–Kwongovou rovnici. Další aproximace: koeficienty smícháme:

$$a = \left(\sum_i x_i a_i^{1/2} \right)^2, \quad b = \sum_i x_i b_i$$

Z ní lze spočítat $F = - \int p dV$, $G = F + pV$ a $\mu_i = \partial G / \partial n_i$ a nakonec φ_i (přesný postup je mimo rozsah této přednášky). Nutno ale iterovat:

1) Položíme $\varphi_i = 1$

2) Z rovnice $K = \frac{a_{\text{NH}_3}^2}{a_{\text{H}_2}^3 a_{\text{N}_2}}$ spočítáme ξ

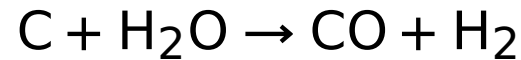
3) Spočítáme x_i

4) Z R–K rovnice spočítáme φ_i

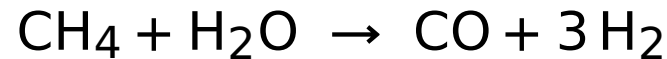
5) Pokračujeme bodem 2), dokud nezkonverguje (3–4 iterace)

metoda	ξ	φ_{N_2}	φ_{H_2}	φ_{NH_3}	x_{N_2}	x_{H_2}	x_{NH_3}
one-fluid EoS	0.6311	1.034	1.064	0.942	0.135	0.404	0.461
Lewis–Randall	0.6289	1.030	1.035	0.915	0.135	0.406	0.459
ideální plyn	0.6035	1	1	1	0.142	0.426	0.432

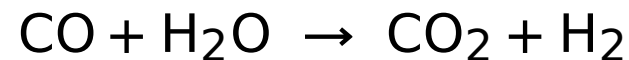
Vodní plyn (syntézní plyn, *syngas*) se historicky vyráběl zplynováním uhlí (koku) vodní parou:



nyní většinou konverzí ze zemního plynu (*steam reforming*), časem se snad dočkáme elektrolýzy...



Pro zvětšení výtěžku vodíku následuje *water-gas shift reaction* ↗



$$K(T) = \frac{a_{\text{CO}_2} a_{\text{H}_2}}{a_{\text{CO}} a_{\text{H}_2\text{O}}} = \frac{\varphi_{\text{CO}_2} \varphi_{\text{H}_2}}{\varphi_{\text{CO}} \varphi_{\text{H}_2\text{O}}} \cdot \frac{\xi^2}{(1-\xi)^2}$$

$$\xi = \frac{\sqrt{K'}}{1 + \sqrt{K'}} \quad \text{kde} \quad K' = \frac{\varphi_{\text{CO}} \varphi_{\text{H}_2\text{O}}}{\varphi_{\text{CO}_2} \varphi_{\text{H}_2}} K$$

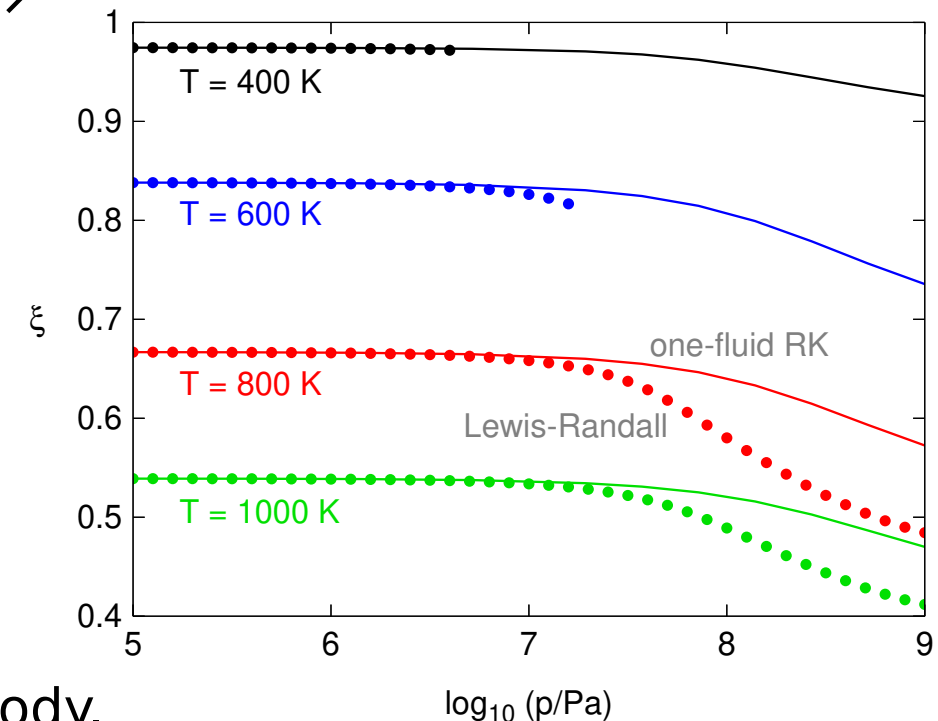
V ideálním případě ($\varphi_i = 1$) nezávisí výtěžek na tlaku.

Výtěžek s tlakem klesá, hl. důsledkem přitažlivých sil ($\varphi < 1$) vody.

stechiometrická vstupní směs

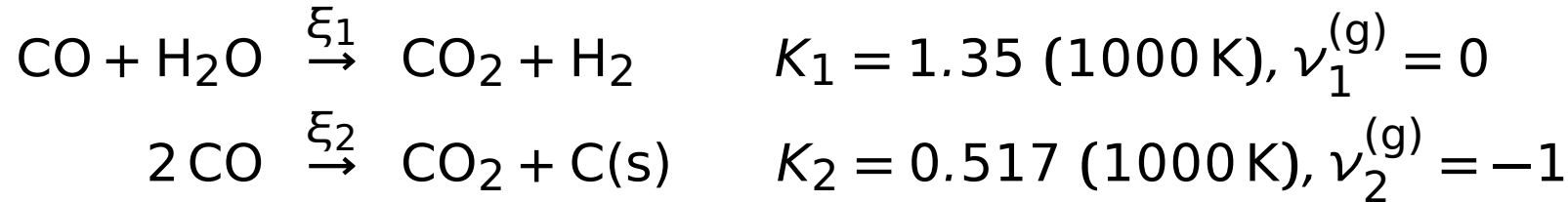
i	$n_{i,0}(\xi)$	n_i
CO	1	$1 - \xi$
H ₂ O	1	$1 - \xi$
CO ₂	0	ξ
H ₂	0	ξ
celkem	2	2

$\nu(\text{g}) = 0$



Ukázka simultánních reakcí: konverze vodního plynu a vznik sazí +

Příklad. Při reakci CO a H₂O mohou probíhat reakce



Vypočtete složení, je-li na počátku n molů H₂O na 1 mol CO a $p_{\text{rel}} = p/p^{\text{st}} = 20$. Plyny jsou ideální.

Rovnice pro rovnováhu:

$$K_1 = \frac{a_{\text{CO}_2} a_{\text{H}_2}}{a_{\text{CO}} a_{\text{H}_2\text{O}}} = \frac{n_{\text{CO}_2} n_{\text{H}_2}}{n_{\text{CO}} n_{\text{H}_2\text{O}}} = \frac{(\xi_1 + \xi_2)\xi_1}{(1 - \xi_1 - 2\xi_2)(n - \xi_1)}$$

$$K_2 = \frac{a_{\text{C(s)}} a_{\text{CO}_2}}{a_{\text{CO}}^2} = \left(\frac{p_{\text{rel}}}{n^{(g)}}\right)^{-1} \frac{n_{\text{CO}_2}}{n_{\text{CO}}^2} = \frac{(1 + n - \xi_2)(\xi_1 + \xi_2)}{p_{\text{rel}}(1 - \xi_1 - 2\xi_2)^2}$$

Podmínky: $n_i \geq 0$, tj. $n_{\text{C}} = \xi_2 > 0$

(položíme $\xi_2 = 0$ a řešíme obě rovnice pro neznámé ξ_1 a n)

● pro $n < 1.3789$ vzniká uhlík (řešíme 2 simultánní rovnice)

● pro $n > 1.3789$ nevzniká uhlík ($\xi_2 = 0$, řešíme jen 1. rov.)

jednotky = [mol]

i	$n_{i,0}(\xi)$	n_i
CO	1	$1 - \xi_1 - 2\xi_2$
H ₂ O	n	$n - \xi_1$
CO ₂	0	$\xi_1 + \xi_2$
H ₂	0	ξ_1
C (s)	0	ξ_2 není plyn
$n^{(g)}$	$1 + n$	$1 + n - \xi_2$

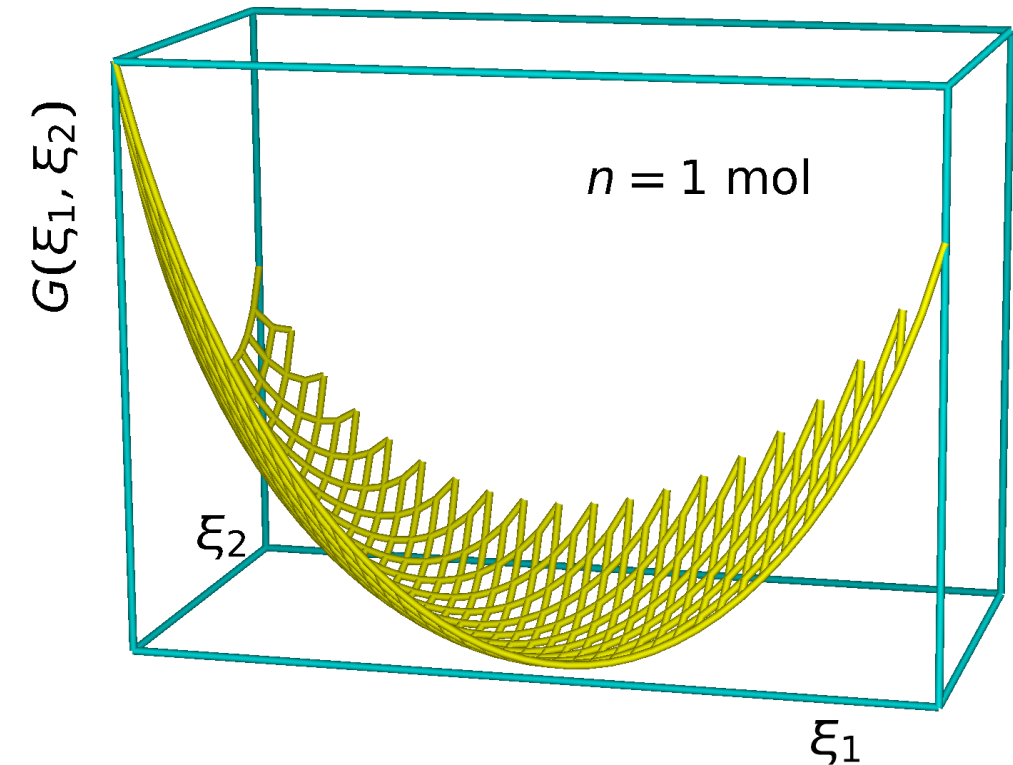
i	$n_i(n = 1)$	$n_i(n = 2)$
CO	0.318	0.290
H ₂ O	0.565	1.290
CO ₂	0.558	0.710
H ₂	0.435	0.710
C (s)	0.123	0

$$G = \sum_i n_i \mu_i$$

$$\begin{aligned}
 G = & (1 - \xi_1 - 2\xi_2) \left[G_{\text{sl}}^\circ(\text{CO}) + RT \ln \left(\frac{1 - \xi_1 - 2\xi_2}{1 + n - \xi_2} p_{\text{rel}} \right) \right] \\
 & + (n - \xi_1) \left[G_{\text{sl}}^\circ(\text{H}_2\text{O}) + RT \ln \left(\frac{n - \xi_1}{1 + n - \xi_2} p_{\text{rel}} \right) \right] \\
 & + (\xi_1 + \xi_2) \left[G_{\text{sl}}^\circ(\text{CO}_2) + RT \ln \left(\frac{\xi_1 + \xi_2}{1 + n - \xi_2} p_{\text{rel}} \right) \right] \\
 & + \xi_1 \left[G_{\text{sl}}^\circ(\text{H}_2) + RT \ln \left(\frac{\xi_1}{1 + n - \xi_2} p_{\text{rel}} \right) \right] \\
 & + \xi_2 G_{\text{sl}}^\circ(\text{C})
 \end{aligned}$$

tyto členy jsou nula

G_{sl}° získáme např. z $\log_{10} K_{\text{sl}} = -G_{\text{sl}}^\circ / RT / \ln 10$



Hledáme minimální systém látek, aby každá další byla lineární kombinací (tj. existovala formálně chemická reakce) těchto látek. Nazývají se **nezávislá složka** (*component*), další látky jsou **odvozené složky** (*noncomponents*).

- Počet nezávislých složek = počet druhů atomů resp. nepřeměňujících se skupin + 1 pro elektron (náboj iontů)
- Pokud některé reakce neprobíhají (některé skupiny se nepřeměňují): >
- Máme-li izomery, které na sebe mohou přecházet: <

Gibbsovo stechiometrické pravidlo:

$$\boxed{\text{počet nezávislých složek}} = \boxed{\text{počet látek}} - \boxed{\text{počet nezávislých reakcí}}$$

- $\{\text{ClO}_2^-, \text{H}^+, \text{Cl}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{ClO}_3^-, \text{ClO}_2\}$
4 = 3 prvky + náboj, např. $\{\text{ClO}_2^-, \text{H}^+, \text{Cl}_2, \text{H}_2\text{O}\}$
Nezávislé reakce např.:



- $\{\text{HClO}_2, \text{Cl}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{HClO}_3, \text{ClO}_2\}$
3 = 3 prvky, např. $\{\text{HClO}_2, \text{Cl}_2, \text{H}_2\text{O}\}$
Nezávislé reakce např.:



- {pentan, isopentan, neopentan}
1 (pokud na sebe mohou izomery volně přecházet)

- {voda, kys. octová, ethanol, ethylacetát}
3 nezávislé složky, 1 reakce (esterifikace)

- $\{\text{MnO}_2, \text{O}_2, \text{MnO}_4^{2-}, \text{H}_2\text{O}, \text{Cl}_2, \text{MnO}_4^-, \text{Cl}^-, \text{H}^+, \text{OH}^-\}$
4 prvky + 1 náboj = 5 nezávislých složek, např. prvních 5. Nezávislé reakce např.:



Stechiometrická metoda:

- Bilance pro každou rovnici pomocí rozsahu reakce

Nestechiometrická metoda:

- Bilance (rovnice) pro přítomné prvky (skupiny), náboj atd. Nevadí, je-li rovnic více, jsou-li správné (tj. jsou lineárně závislé).

$$-n(\text{ClO}_2^-) + n(\text{H}^+) - n(\text{ClO}_3^-) = 0$$

(náboj)

$$n(\text{ClO}_2^-) + 2n(\text{Cl}_2) + n(\text{ClO}_3^-) + n(\text{ClO}_2) = n_0(\text{Cl})$$

$$2n(\text{ClO}_2^-) + n(\text{H}_2\text{O}) + 3n(\text{ClO}_3^-) + 2n(\text{ClO}_2) = n_0(\text{O})$$

$$n(\text{H}^+) + 2n(\text{H}_2\text{O}) = n_0(\text{H})$$

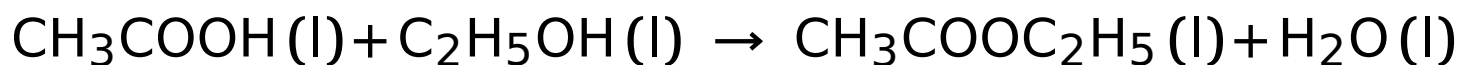
Řešení soustavy rovnic

- Tolik rovnic, kolik je nezávislých reakcí.
- Ideální chování \Rightarrow algebraická rovnice (na počítači snadné).
Neideální směs \Rightarrow transcendentní rovnice, mohou nastat numerické problémy.
- Na konci vybereme řešení, pro které platí $n_i \geq 0$.

Metoda minimalizace G :

- Minimalizují výraz pro $G(n_i)$ za podmínek $n_i \geq 0$
Existují efektivní a robustní numerické metody i pro velmi mnoho proměnných.

Příklad. Rovnovážná konstanta reakce



je $K = 13.5$ při $25\text{ }^\circ\text{C}$. Vypočtete molární zlomek esteru v rovnovážné směsi při ekvimolárním nástřiku a předpokladu ideálního chování.

i	$n_{i,0}(\xi)$	n_i
CH_3COOH	0.5	$0.5 - \xi$
$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	0.5	$0.5 - \xi$
$\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$	0	ξ
H_2O	0	ξ
celkem	1	1

$$K = \frac{a_{\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5} a_{\text{H}_2\text{O}}}{a_{\text{CH}_3\text{COOH}} a_{\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}}} = \frac{x_{\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5} x_{\text{H}_2\text{O}}}{x_{\text{CH}_3\text{COOH}} x_{\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}}} = \left(\frac{\xi}{0.5 - \xi} \right)^2$$

$$\xi = \frac{0.5 \sqrt{K}}{1 + \sqrt{K}} = x_{\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5} = \underline{0.393} \quad (\text{experiment: } 0.333)$$

- methyl butyrate smells of pineapple or apple
- methyl salicylate (oil of wintergreen) smells of the ointments called Germolene and Ralgex in the UK
- methyl benzoate smells of fruity ylang-ylang
- ethyl formate smells of rum
- ethyl butyrate smells of pineapple etc.
- ethyl salicylate smells of oil of wintergreen
- ethyl heptanoate and methyl anthranilate smell of grape
- propyl isobutyrate and isobutyl propionate smell of rum
- isobutyl formate smells of raspberries
- butyl butyrate smells of pineapple
- pentyl acetate smells of banana
- isoamyl acetate (3-methylbutyl ethanoate) smells of banana, also alarm pheromone for honey bees
- pentyl pentanoate smells of apple
- pentyl butyrate smells of pear or apricot
- propyl acetate smells of pear
- isopentyl acetate smells of pear or banana
- octyl acetate smells of fruity-orange
- benzyl acetate smells slightly of jasmine or peach
- ethyl phenylacetate smells of honey