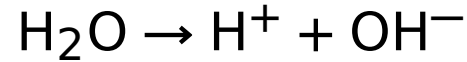


Iontový součin vody  $K_w$  je rovnovážná konstanta reakce

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



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 srovnejte s tabulkovou hodnotou neutralizačního tepla (silné kyseliny se silnou bází)  $-57.6 \text{ kJ mol}^{-1}$  ( $25^\circ\text{C}$ ).

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

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

Za předpokladu konstantní reakční entalpie integrujeme

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

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

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

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. %  $\text{N}_2$  a 60 mol. %  $\text{H}_2$  za tlaku 10 MPa. Jaká je hodnota  $K$ , jestliže tlak po ustavení rovnováhy byl 7.6 MPa? ( $p^{\text{st}} = 0.1 \text{ MPa}$ )?

$i$	$p_{i,0} \text{ [MPa]}$	$p_i(\Delta p) \text{ [MPa]}$
$\text{N}_2$	4	$4 - \Delta p$
$\text{H}_2$	6	$6 - 3\Delta p$
$\text{NH}_3$	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.
- 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  $p^{\text{st}}$ .
- 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

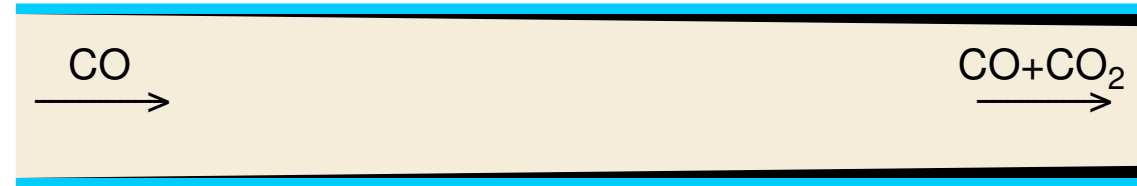


**a)** Kolik gramů sazí vznikne z 1 molu přiváděného plynu?

**b)** Kolik musíme přidat  $\text{CO}_2$  k 1 mol  $\text{CO}$ , 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 <sub>2</sub> (g)	0	$\xi$
C (s)	0	$\xi$ (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  $1 \text{ dm}^3$  vložíme jeden gram pevného chloridu amonného ( $M = 53.5 \text{ g mol}^{-1}$ ), evakuujeme a uzavřeme. Poté nádobu vytemperujeme na teplotu  $600 \text{ K}$ . Jaký bude tlak uvnitř nádoby? Rovnovážná konstanta disociace  $\text{NH}_4\text{Cl}$  při  $600 \text{ K}$  je  $0.0836$  ( $p^{\text{st}} = 1 \text{ atm}$ ).



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

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

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

Poznámky:

1. Ve skutečnosti je v parách malé množství molekul  $\text{NH}_4\text{Cl}$ .
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  $1 \text{ g}$

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	$\xi_{\text{min}}$
$= 1$	$= 0$	konstanta	$[\xi_{\text{min}}, \xi_{\text{max}}]$
$> 1$	$< 0$	klesá	$\xi_{\text{max}}$



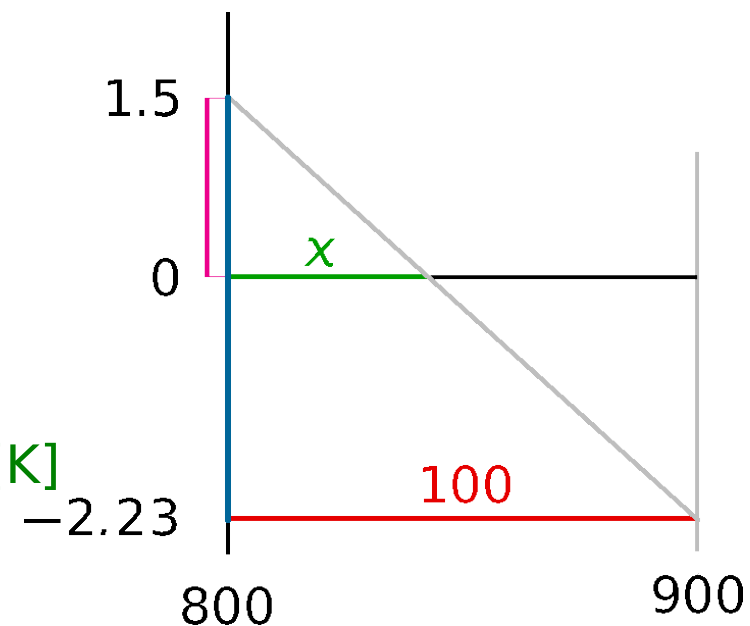
Při jaké teplotě mohou spolu koexistovat tři pevné fáze Fe, FeO a Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>? Určete rovnovážný stav systému při teplotách 800 K a 900 K, jsou-li na počátku dva moly Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> a tři moly Fe. Data:

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 <sub>3</sub> O <sub>4</sub> (s)	-848.54	-818.45	2	2 - $\xi$
Fe (s)	0	0	3	3 - $\xi$
FeO (s)	-211.76	-205.17	0	4 $\xi$

**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 Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> + 3 mol Fe

**900 K:**  $\Delta_r G_m^\ominus = 4 \cdot (-205.17) - (-818.45) = -2.23 [\text{kJ mol}^{-1}]$   
 směr:  $\rightarrow$ ,  $\xi = \xi_{\text{max}} = 2$  (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> 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  $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$  za teploty 600 K a tlaku 10 MPa, je-li vstupní směs stechiometrická. Rovnovážná konstanta je za těchto podmínek rovna  $K = 0.001703$ .

$i$	$n_{i,0}(\xi)$	$n_i$
$\text{N}_2$	1	$1 - \xi$
$\text{H}_2$	3	$3 - 3\xi$
$\text{NH}_3$	0	$2\xi$
celkem	4	$4 - 2\xi$

**aproximace fugacitních koeficientů: Lewisovo–Randallovo pravidlo**

Pro  $i \in \{\text{N}_2, \text{H}_2, \text{NH}_3\}$ :

- 1) vypočítat objem  $V_{i,m}$  z Redlichovy–Kwongovy rovnice (čistá látka)
- 2) fugacitní koeficient: (viz [fchab10](#))

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

$$\Rightarrow \varphi_{\text{NH}_3} = 0.915, \quad \varphi_{\text{N}_2} = 1.030, \quad \varphi_{\text{H}_2} = 1.035$$

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

$$K = \frac{a_{\text{NH}_3}^2}{a_{\text{H}_2}^3 a_{\text{N}_2}} \Rightarrow \underline{\xi = 0.6289} \quad (\xi_{\text{id. plyn}} = 0.6035)$$

$$\Rightarrow x_{\text{N}_2} = \underline{0.135}, \quad x_{\text{H}_2} = \underline{0.406}, \quad x_{\text{NH}_3} = \underline{0.459}$$

$$\text{id. plyn: } x_{\text{N}_2} = 0.142, \quad x_{\text{H}_2} = 0.426, \quad x_{\text{NH}_3} = 0.432$$

$$a_{\text{N}_2} = \frac{p\varphi_{\text{N}_2}}{p^{\text{st}}} \cdot \frac{1 - \xi}{4 - 2\xi}$$

$$a_{\text{H}_2} = \frac{p\varphi_{\text{H}_2}}{p^{\text{st}}} \cdot \frac{3 - 3\xi}{4 - 2\xi}$$

$$a_{\text{NH}_3} = \frac{p\varphi_{\text{NH}_3}}{p^{\text{st}}} \cdot \frac{2\xi}{4 - 2\xi}$$

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  $\varphi_i$  (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  $\xi$

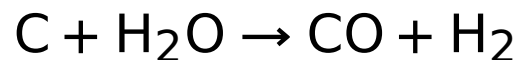
3) Spočítáme  $x_i$

4) Z R–K rovnice spočítáme  $\varphi_i$

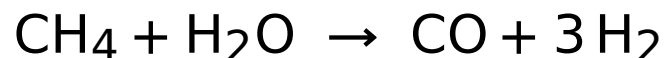
5) Pokračujeme bodem 2), dokud nezkonverguje (3–4 iterace)

metoda	$\xi$	$\varphi_{\text{N}_2}$	$\varphi_{\text{H}_2}$	$\varphi_{\text{NH}_3}$	$x_{\text{N}_2}$	$x_{\text{H}_2}$	$x_{\text{NH}_3}$
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

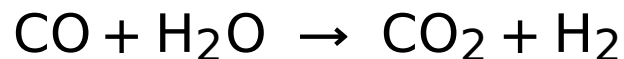
**Vodní plyn** (syntézní plyn, *syngas*) se historicky vyráběl zplynováním uhlí (koku) vodní parou:



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



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



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

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

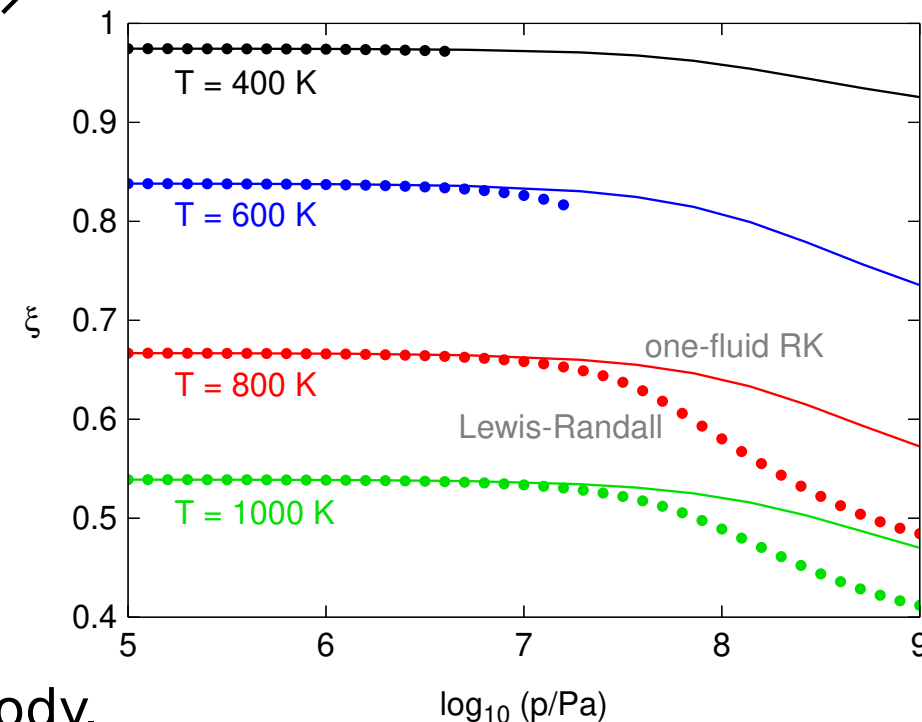
V ideálním případě ( $\varphi_i = 1$ ) nezávisí výtěžek na tlaku.

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 <sub>2</sub> O	1	$1 - \xi$
CO <sub>2</sub>	0	$\xi$
H <sub>2</sub>	0	$\xi$
celkem	2	2

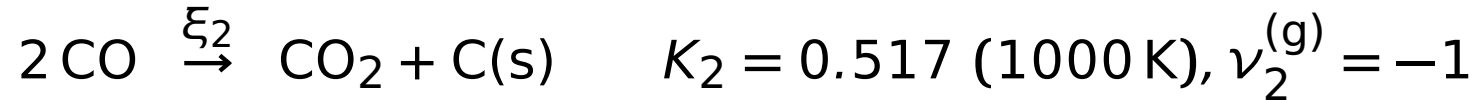
$\nu(\text{g}) = 0$



# Ukázka simultánních reakcí: konverze vodního plynu a vznik sazí +

**Příklad.** Při reakci CO a H<sub>2</sub>O mohou probíhat reakce

jednotky = [mol]



Vypočtete složení, je-li na počátku  $n$  molů H<sub>2</sub>O 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  $\xi_1$  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.)

$i$	$n_{i,0}(\xi)$	$n_i$
CO	1	$1 - \xi_1 - 2\xi_2$
H <sub>2</sub> O	$n$	$n - \xi_1$
CO <sub>2</sub>	0	$\xi_1 + \xi_2$
H <sub>2</sub>	0	$\xi_1$
C (s)	0	$\xi_2$
$n^{(g)}$	$1 + n$	$1 + n - \xi_2$

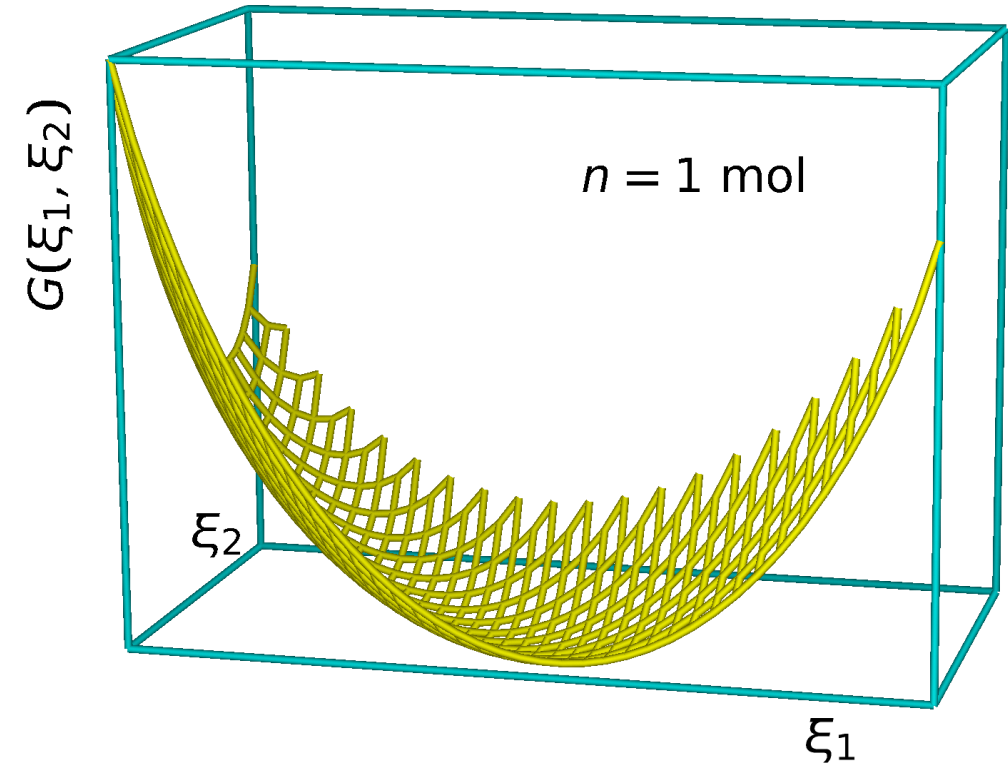
$i$	$n_i(n = 1)$	$n_i(n = 2)$
CO	0.318	0.290
H <sub>2</sub> O	0.565	1.290
CO <sub>2</sub>	0.558	0.710
H <sub>2</sub>	0.435	0.710
C (s)	0.123	0

$$G = \sum_i n_i \mu_i$$

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

tyto členy jsou nula

$G_{\text{sl}}^\circ$  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

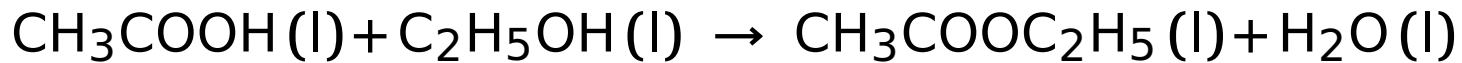
- Tolik rovnic, kolik je nezávislých reakcí.
- Ideální chování  $\Rightarrow$  algebraická rovnice (na počítači snadné).  
Neideální směs  $\Rightarrow$  transcendentní rovnice, mohou nastat numerické problémy.
- Na konci vybereme řešení, pro které platí  $n_i \geq 0$ .

## 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.

$i$	$n_{i,0}(\xi)$	$n_i$
$\text{CH}_3\text{COOH}$	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	$\xi$
$\text{H}_2\text{O}$	0	$\xi$
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