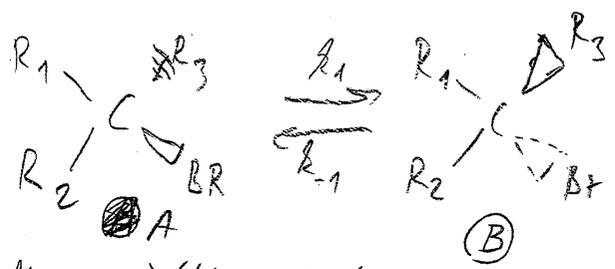


Zvratná reakce

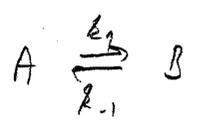
Zvratná reakce



probíhá rychlostmi  $k_1$  a  $k_{-1}$  odpovídajícími poločasům:

$\tau_1 = 10 \text{ min}$ ,  $\tau_{-1} = 15 \text{ min}$   
 reakce se řídí kinetikou 1. řádu  
 A o koncentraci  $A_0 = 1 \text{ mol l}^{-1}$

a, vypočítejte rychlostní konstanty  $k_1$  a  $k_{-1}$ .



$$\frac{d\xi}{dt} = k_1 \cdot A - k_{-1} \cdot B$$

1. řád:

$$\tau_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$$

$$\Rightarrow k_1 = \ln 2 / \tau_{1/2,1} = \ln 2 / 10 = \underline{\underline{0.0693 \text{ min}^{-1}}}$$

2.

$$k_{-1} = \ln 2 / \tau_{1/2,-1} = \ln 2 / 15 = \underline{\underline{0.046 \text{ min}^{-1}}}$$

b, vypočítejte k rovnovážné složení směsi

$B_0 = 0$       Rovnováha  
 "      "

$$\frac{d\xi}{dt} = -\frac{dA}{dt} = \frac{dB}{dt} = k_1 \cdot A - k_{-1} \cdot B = k_1 \cdot (A_0 - \xi) - k_{-1} \cdot (B_0 + \xi) = 0$$

$$\Rightarrow k_1 \cdot (A_0 - \xi_r) = k_{-1} \cdot \xi_r$$

$$k_1 A_0 - k_1 \xi_r = k_{-1} \xi_r$$

$$\xi_r \cdot (k_1 + k_{-1}) = k_1 A_0 \quad \Rightarrow \quad \xi_r = \frac{k_1 \cdot A_0}{k_1 + k_{-1}} = \frac{0.0693 \cdot 1}{0.0693 + 0.046} = 0.6 \text{ mol l}^{-1}$$

Dopčet koncentrací:  $I = I_0 + \nu_I \cdot \xi_r \Rightarrow B_r = B_0 + 1 \xi_r = 0 + 0.6 = \underline{\underline{0.6 \text{ mol l}^{-1}}}$   
 $A_r = A_0 - 1 \xi_r = 1 - 0.6 = \underline{\underline{0.4 \text{ mol l}^{-1}}}$

c, Jaké bude složení reakční směsi v čase t

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{dB}{dt} = k_1 \cdot A - k_{-1} \cdot B = k_1 \cdot (A_0 - \xi) - k_{-1} \cdot (B_0 + \xi)$$

Separace:

$$dt = \frac{1}{k_1(A_0 - \xi) - k_{-1}(B_0 + \xi)} \cdot d\xi$$

Integrace

$$\int_0^t dt = \int_0^\xi \frac{1}{k_1(A_0 - \xi) - k_{-1}(B_0 + \xi)} d\xi$$

$$[t]_0^t = \left[ \ln \left[ \frac{k_1(A_0 - \xi) - k_{-1}(B_0 + \xi)}{k_1 A_0 - k_{-1} B_0} \right] \cdot \frac{1}{-(k_1 + k_{-1})} \right]_0^\xi$$

$$t = \frac{1}{-(k_1 + k_{-1})} \cdot \left\{ \ln \left[ \frac{k_1(A_0 - \xi) - k_{-1}(B_0 + \xi)}{k_1 A_0 - k_{-1} B_0} \right] - \ln \left[ \frac{k_1 A_0 - k_{-1} B_0}{k_1 A_0 - k_{-1} B_0} \right] \right\}$$

Úpravy:

$$-(k_1 + k_{-1}) \cdot t = \frac{\ln \left[ \frac{k_1(A_0 - \xi) - k_{-1}(B_0 + \xi)}{k_1 A_0 - k_{-1} B_0} \right]}{1}$$

$$\frac{k_1(A_0 - \xi) - k_{-1}(B_0 + \xi)}{k_1 A_0 - k_{-1} B_0} = \exp \left[ -(k_1 + k_{-1})t \right]$$

$$k_1 A_0 - k_{-1} B_0 - \xi \cdot (k_1 + k_{-1}) = (k_1 A_0 - k_{-1} B_0) \cdot \exp \left[ -(k_1 + k_{-1})t \right]$$

$$\xi = \frac{1}{k_1 + k_{-1}} \cdot \left\{ (k_1 A_0 - k_{-1} B_0) - (k_1 A_0 - k_{-1} B_0) \cdot \exp \left[ -(k_1 + k_{-1})t \right] \right\} =$$

$$\frac{(k_1 A_0 - k_{-1} B_0)}{(k_1 + k_{-1})} \cdot \left\{ 1 - \exp \left[ -(k_1 + k_{-1})t \right] \right\}$$

$$\xi_{\text{rozli}} = \frac{0.0693 \cdot 1 - 0}{0.0693 + 0.046} \cdot \left( 1 - \exp \left[ -(0.0693 + 0.046) \cdot 20 \right] \right) = 0.60$$

$$A = A_0 - 1 \cdot \xi = A_0 - \#$$

$$B = B_0 + 1 \cdot \xi = B_0 + \#$$

d, vypočítejte složení po různých časech a vyj. graficky

čas [t]	0	5	10	15	20	∞
ξ	0	0.26	0.41	0.49	0.6	
[A]	1	0.74	0.59	0.51	0.4	
[B]	0	0.26	0.41	0.49	0.6	

