

## Reakce H2S

<a href="#">výchozí množství/mol</a>	$[n^0]_{B^{\wedge}}$	H2S	O2	H2O	
<a href="#">stechio koeficienty</a>	$\nu_{B^{\wedge}}$		20	50	10
<a href="#">1 obrat v molech je když:</a>			-2	-3	2
			-2	-3	2

[Situace v čase:](#)

[Když zreagují 2mol H2S](#)

[rozsah reakce =  \$\frac{n\(t\)-n\(0\)}{\nu\_i}\$](#)

$$[n^t]_{B^{\wedge}}$$

$$\xi$$

**Je-li počet obrátů jiný:**

počet provedených obrátů  
reakce = **rozsah reakce**  $\xi_t$

zreagované nebo vzniklé  
množství v molech za čas t  $[n^t]_{B^{\wedge}} - [n^0]_{B^{\wedge}}$

kolik zbývá  $[n^t]_{B^{\wedge}}$

$$\xi_t = ([n^t]_{B^{\wedge}} - [n^0]_{B^{\wedge}}) / \nu_{B^{\wedge}}$$

kontrola rozsahu reakce =  $\frac{[n^t]_{B^{\wedge}} - [n^0]_{B^{\wedge}}}{\nu_{B^{\wedge}}}$

**rychlost konverze**  
(molová)=d (okamžitý  
rozsah)/dt

$$\dot{\xi} = (d\xi)/dt$$

**chychlost reakce**  
(objemová)  $\dot{v} = \frac{1}{V} (d\xi)/dt$   
 $\dot{v} = \frac{1}{V} (d\xi)/dt$

A α	alfa	N ν	ny
B β	béta	Ξ ζ	ksi
Γ γ	gamma	Ο ο	omikron
Δ δ	delta	Π π	pi
Ε ε	epsilon	Ρ ρ	ró
Z ζ	dzéta	Σ σ	sigma
Η η	éta	Τ τ	tau
Θ θ	théta	Υ υ	ypsilon
Ι ι	jóta	Φ φ	fi
Κ κ	kappa	Χ χ	chi
Λ λ	lambda	Ψ ψ	psi
Μ μ	my	Ω ω	ómega

$2\text{H}_2\text{S} + 3\text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O} + 2\text{SO}_2$   
 konstantní teplota 25°C a tlak 1Atm  
 objem reakční nádoby 1000 dm<sup>3</sup>

SO<sub>2</sub>

0 nestechiometrická vsázka  
 2  
 2 molů se změnil rozsah = 1  
 maximální počet obrátů = 10

tj. provedl se 1 obrát reakce  
 tj. rozsah reakce je 1, když se provedl 1 obrát reakce

za

$\Delta t =$  0,01 sec  
 "Sem  
 zadejte  
 rovnici."

nesmí být záporné

vyjde vždy stejně od 0 až k (vych.množství minoritního reaktantu)/(jeho stech koef.)=10

rozsah reakce v molech za sekundu dělený dt pro dt-->0

mol l-1 /sec

**Vysvětlit:**

**1 Obrát**

**Rozsah (konverze)**

$$\xi = \frac{n'_B - n_B}{\nu_B}$$

**Rychlost konverze**

$$\xi' = \frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{\nu_B} \frac{dn_B}{dt}$$

**Rychlost reakce**

$$v = \frac{1}{V} \frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{\nu_B} \frac{dc_B}{dt}$$

**používají hlavně tech**

**používají hlavně chei**

$$\frac{dn_B}{dt} = \frac{\Delta n_B}{V_B}$$

Stupeň konverze (někdy v %)

$$\xi = \xi / \xi_{\max}$$

"ksi"

jednotka: mol·s<sup>-1</sup>

(jednotka: mol·dm<sup>-3</sup>·s<sup>-1</sup>)

Stupeň reakce  
(např. stupeň  
disociace,  
dimerace, ...)

$$\xi = \xi / \xi_{\max}$$

inologové

(někdy v %)

mici (analytici)

"dzeta"

## Rozsah reakce, definice rychlosti reakce, objemová rychlost reakce

### Oxidy dusíku

<http://cs.wikipedia.org/wiki/Dus%C3%ADk>

	$\xi$	NO	O <sub>2</sub>	NO <sub>2</sub>	
<a href="#">výchozí množství/mol</a>	$n_{B^0}$	100	250	10	
<a href="#">stechio koeficienty</a>	$\nu_{B^0}$	-2	-1	2	
<a href="#">1 obrat je když dojde ke změně vsázky o:</a>		-2	-1	2	

pokud dojde k rozsahu reakce ve výši následujícího počtu obrátů reakce

$\xi$

2

pak změna molů vsázky je

$$\frac{n_{B^t} - n_{B^0}}{\nu_{B^0}}$$

v reaktoru zbývá

$$n_{B^t} = (n_{B^0} - \nu_{B^0} \xi)$$

kontrola rozsahu reakce =  $(n_i(t) - n_i(0)) / \nu_i$   
**rychlost konverze** (molová) =  $d\xi / dt$   
 (okamžitý obrat)/dt

**rychlost reakce** (objemová)

$$v = \frac{1}{V} \frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{V} \frac{dn}{dt}$$

**POZOR** množství produktů v čase nula může být nenulové (tj. reakce už v nějakém rozsahu proběhla)

$\xi(\text{před}) =$

maximální počet obrátů

$\xi_{\max}$

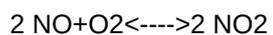
stupeň konverze

$\xi / \xi_{\max}$

stupeň reakce

$\xi / \xi_{\max}$

$\xi_t$



konstantní teplota 25stC a tlak 1Atm

objem reakční nádoby 1000 dm<sup>3</sup>

nadbytek O<sub>2</sub>

maximální proveditelný počet obrátů= 50

za  $\Delta t =$  0,1 sec

nesmí být záporné

vyjde vždy stejně od 0 do nějakého čísla. Zde do hodnoty 50 (max. lze v tomto případě us

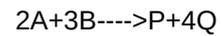
počet molů za sekundu. Okamžitou rychlost správně spočteme pokud  $dt \rightarrow 0$

mol l<sup>-1</sup> /sec

vybereme nejnižší číslo

kutečnit 50obratu)

Obecně



[výchozí množství/mol](#)  
[stechio koeficienty](#)  
[1 obrat je když:](#)

	A	B
$n^0_B$	100	250
$n_B$	-2	-3

Je-li počet obrátů jin

[počet provedených obrátů reakce](#)  
 zreagované nebo vzniklé množství v molech za čas t  
 kolik zbývá

$$\xi = \frac{n^t_B - n^0_B}{\nu_B}$$

kontrola rozsahu reakce =  $n_i(t) - n_i(0) / \nu_i$   
**rychlost konverze** (v molech obrátů) =  $d\xi / dt$  (okamžitý obrát)/dt

$$n^t_B = (n^0_B - \nu_B \xi)$$

$$\nu_B = \frac{dn_B}{d\xi}$$

$$\xi = \int \frac{dn_B}{\nu_B}$$

**rychlost reakce** (objemová konverze)

$$v = \frac{1}{V} \frac{d\xi}{dt}$$

$$\xi(\text{před}) =$$

$$\xi_{\text{max}}$$

$$\xi = \xi_{\text{max}}$$

tj.

$$\xi = \xi_{\text{max}}$$

tj.

konstantní teplota 25stC a tlak 1Atm  
objem reakční nádoby: 1000 dm<sup>3</sup>

P Q  
20  
1

0 nestechiometrická vsázka

4 molů se změní maximální proveditelný počet obrátů=

ý:

**za**  
 $\Delta t$  0,01 sec

nesmí být záporné

obrázek závislost rozsahu na čase  
obrázek závislost rychlost reakce

vyjde vždy stejně

počet molů za sekundu, nutno přejít k udajům za malou změnu času

mol l-1 /sec

vybereme nižší číslo

0,0%

0,0%

e  
na čase

Reakce:  $2A+3B \rightarrow 2C+2D$

např.: pomalá organická reakce

	A		B	C	D	
v		-2		-3	2	2
exp. Naměřeno	rozsah reakce (konverze)					
t/hod	nA/mol	ξ/mol obrátů	nB/mol	nC/mol	nD/mol	ξ' = dξ/dt
0		20	0	50	0	0
0,01	18,0967483607					
0,02	16,3746150616					
0,03	14,8163644136					
0,04	13,4064009207					
0,05	12,1306131943					
0,06	10,9762327219					
0,07	9,93170607583					
0,08	8,98657928234					
0,09	8,13139319481					
0,1	7,35758882343					
0,11	6,65742167396					
0,12	6,02388423824					
0,13	5,45063586068					
0,14	4,93193927883					
0,15	4,46260320297					
0,16	4,03793035989					
0,17	3,65367048105					
0,18	3,30597776443					
0,19	2,99137238445					
0,2	2,70670566473					
nek		0				

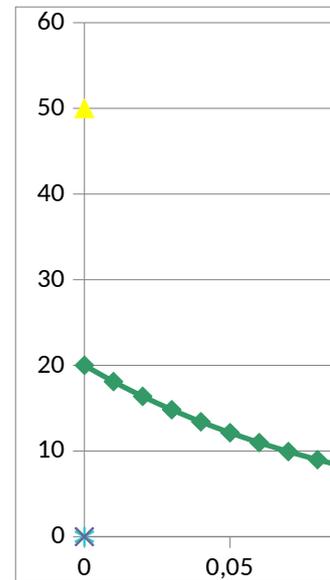
$$\xi = \frac{n_B^t - n_B^0}{\nu_B} = \frac{\Delta n_B^t}{\nu_B}$$

$$n_i^t = n_i^0 + \nu_i \xi$$

$$\xi^t = \frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{\nu_B} \frac{dn_B}{dt}$$

V= 1000 dm<sup>3</sup>

<b>rozsah reakce (konverze)</b>	<b>rychlost reakce</b>
<b>konverze v dm<sup>3</sup></b>	<b>v jednotce ob</b>
<b>č/mol ob. v dm<sup>3</sup></b>	<b>α=ξ/ξ(max.)</b>
<b>α= ζ/ζ(zcela)</b>	<b>v=dζ/dt</b>
	<b>α=ξ/ξ(max.)</b>



$$v = \frac{1}{V} \frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{\nu_B} \frac{dc_B}{dt}$$

(jednotka: mol·dm<sup>-3</sup>·s<sup>-1</sup>)

ξ                      jednotka: mol·s<sup>-1</sup>

$$d\xi = (d\xi) / V$$

