

Varianta A k procvičení

1. Látka A reaguje dvěma jednosměrnými reakcemi prvního řádu na látky B a C:



Na počátku obsahoval reaktor o konstantním objemu čistou látku A. Po 20 minutách od počátku reakce obsahovala reakční směs 48 mol.% výchozí látky A a 22 mol.% B. Zjistěte složení směsi (v mol.%) po dalších 20 minutách. Vypočítejte hodnoty obou rychlostních konstant. Objem systému je konstantní.

[Řešení: $k_1=0,01553 \text{ min}^{-1}$; $k_2=0,02117 \text{ min}^{-1}$; $x_B=0,33$; $x_A=0,23$; $x_C=0,44$]

2. Rozhodněte, zda reakce rozkladu látky A na produkty je prvního či druhého řádu či jiného řádu (pokud je reakce jiného řádu, řád číselně neurčujte, pouze musíte ukázat, že se nejedná ani o první ani o druhý řád). Pokud se jedná o reakci prvního či druhého řádu, určete hodnotu rychlostní konstanty včetně rozměru a poločas reakce. K dispozici máte hodnoty okamžité koncentrace látky A v závislosti na čase (viz tabulka). Na začátku byla v systému pouze látka A, objem je konstantní.

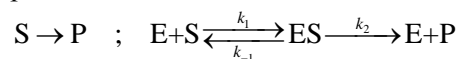
τ [s]	0	20	180	530
c_A [mol/dm ³]	5	3,501	1,030	0,405

[Řešení: 2.řád; $k = 4,28 \cdot 10^{-3} (\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3})^{-1} \text{ s}^{-1}$.]

3. Látka A reaguje jednosměrnou reakcí třetího řádu na látku B. Při teplotě 300 K je hodnota rychlostní konstanty $0,01 (\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3})^{-2} \text{ s}^{-1}$. Při jaké teplotě je třeba provádět reakci, aby hodnota rychlostní konstanty byla desetkrát vyšší? Hodnota aktivační energie je 500 J/g (na gram látky A), Molární hmotnost látky A je 120 g/mol.

[Řešení: 331,8 K]

3. Za jak dlouho poklesne koncentrace substrátu v reakci katalyzované enzymem na jednu třetinu počáteční koncentrace? Schéma reakce se dá zapsat jako



Počáteční koncentrace substrátu je 2 mol/dm^3 , analytická celková koncentrace enzymu je $0,01 \text{ mol/dm}^3$. Rychlostní konstanta rozpadu enzymového aktivovaného komplexu je $k_2 = 0,6 \text{ s}^{-1}$. Michaelisova konstanta pro tento systém má hodnotu $K_M = 1,5 \text{ mol dm}^{-3}$, tzn. koncentrace substrátu je srovnatelná s hodnotou Michaelisovy konstanty. Objem systému je konstantní.

[Řešení: 497 s]

Varianta B k procvičení

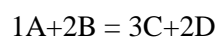
1. Látka A se rozkládá dle schématu: $1A \longrightarrow 1B \longrightarrow 1C$. Obě následné reakce jsou prvního řádu. V literatuře je pro rychlostní konstantu rozkladu B na C při 20°C udána hodnota: $k_2 = 3,6 \cdot 10^{-5} \text{ min}^{-1}$. Určete složení reagující směsi v molárních procentech v čase 55 h od počátku reakce v uzavřeném reaktoru o konstantním objemu. Ví se, že za 10 hodinu zreagovalo 25 procent původně přítomné látky A. Určete čas, kdy je dosaženo maximální koncentrace látky B.

[20,55 mol.% A, 73,79 mol.% B, 5,66 mol.% C; 97,3h]

2. Určete řád reakce a hodnotu rychlostní konstanty včetně rozměru u rozkladu látky A na produkty. Při prvním pokusu se koncentrace změnila z počáteční hodnoty $0,5 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3}$ na $0,496 \text{ mol/dm}^3$ za 3 sekundy. Při druhém pokusu se koncentrace změnila z hodnoty 1 mol/dm^3 změnila na $0,99 \text{ mol/dm}^3$ rovněž za 3 sekundy. Předpokládejte, že při určení okamžité rychlosti reakce lze nahradit hodnotu derivace $dc_A/d\tau$ podílem diferencí s tím, že hodnoty okamžité rychlosti odpovídají koncentracím v polovině koncentračních intervalů (tzn. $0,498$ resp. $0,995 \text{ mol/dm}^3$).

[Řešení: řád 1,324; $k = 1,174 \cdot 10^{-3} (\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3})^{-0,324} \text{ s}^{-1}$.]

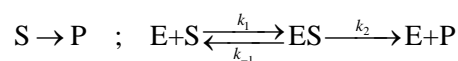
3. Počáteční diferenciální rychlost $-dc_A/d\tau$ jednosměrné reakce



má při počátečních koncentracích $c_A^0 = 0,25 \text{ mol/dm}^3$ a $c_B^0 = 0,5 \text{ mol/dm}^3$ a teplotě 300 K hodnotu $0,005 (\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3}) \text{ s}^{-1}$. Jaká by musela být teplota, aby při stejných počátečních koncentracích hodnota počáteční diferenciální rychlost byla trojnásobná? Hodnota aktivační energie je 69 kJ/mol.

[Řešení: 312,4 K]

4. Za jak dlouho poklesne koncentrace substrátu v reakci katalyzované enzymem na jednu třetinu počáteční koncentrace, která byla 1 mol/dm^3 ? Schéma reakce se dá zapsat jako



analytická celková koncentrace enzymu je $0,01 \text{ mol/dm}^3$. Michaelisova konstanta pro tento systém má hodnotu $K_M = 1,5 \text{ mol dm}^{-3}$, tzn. koncentrace substrátu je srovnatelná s hodnotou Michaelisovy konstanty. Objem systému je konstantní. Hodnotu rychlostní konstanta rozpadu enzymového aktivovaného komplexu určete z informace, že při výchozí koncentraci $0,01 \text{ mol/dm}^3$ (hodnota o hodně nižší než hodnota Michaelisovy konstanty) a koncentraci enzymu $0,01 \text{ mol/dm}^3$ za 10 minut zreaguje 20 % substrátu.

[Řešení: 69,2 min]

Variananta C k procvičení

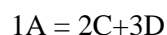
1. U rovnovážné reakce $A \rightleftharpoons B$ byly zjištěny v reakční směsi rovnovážné koncentrace 2 mol/dm^3 látky A a 3 mol/dm^3 látky B. Při experimentu, kdy se vycházelo pouze z látky A bez přítomnosti látky B, poklesla molární koncentrace látky A za 100 minut z hodnoty 5 mol/dm^3 na hodnotu 4 mol/dm^3 . Určete hodnoty jednotlivých rychlostních konstant dopředné a zpětné reakce, které jsou obě prvního řádu.

[$k_1 = 2,43 \cdot 10^{-3} \text{ min}^{-1}$; $k_{-1} = 1,62 \cdot 10^{-3} \text{ min}^{-1}$]

2. V systému probíhá jednosměrná reakce $1A + 1B \rightarrow \text{produkty}$. Dílčí řád reakce vůči složce B je 1. Pokud byla koncentrace látky B udržována doplňováním na konstantní hodnotě $0,5 \text{ mol/dm}^3$ a počáteční koncentrace látky A byla $0,5 \text{ mol/dm}^3$, byl poločas reakce týkající se látky A 20,3 minuty. V druhém experimentu byla koncentrace látky B rovněž udržována doplňováním na konstantní hodnotě $0,5 \text{ mol/dm}^3$, ale počáteční koncentrace látky A byla $0,2 \text{ mol/dm}^3$. I v tomto případě byl poločas reakce týkající se látky A 20,3 minuty. Určete dílčí řád reakce vůči složce A a hodnotu rychlostní konstanty včetně rozměru u této jednosměrné reakce.

[Výsledek: řád vůči složce A je také 1, neboť poločas reakce nezávisí na počáteční koncentraci látky A. $k_1 = 6,83 \cdot 10^{-2} (\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3})^{-1} \cdot \text{min}^{-1}$ (celkově druhý řád !!!!!); koncentrace látky B je v obou případech stejná a zahrne se do hodnoty „pseudokonstanty“, z které se vypočte hodnota rychlostní konstanty vydělením hodnotou koncentrace látky B (kombinace metody určování řádu reakce z poločasu reakce a izolační metodou)]

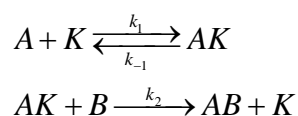
3. Elementární reakce



je druhého řádu vzhledem k látce A. Při teplotě 20°C poklesla počáteční koncentrace látky A z hodnoty $c_A^0 = 0,25 \text{ mol/dm}^3$ na hodnotu $0,1 \text{ mol/dm}^3$ za 10 minut. Při dalším experimentu prováděném při teplotě 40°C poklesla počáteční koncentrace látky A z hodnoty $c_A^0 = 0,5 \text{ mol/dm}^3$ na hodnotu $0,1 \text{ mol/dm}^3$ za 4 minuty. Určete hodnotu aktivační energie, která je teplotně nezávislá.

[Výsledek: $45,95 \text{ kJ/mol}$]

4. Reakce $A + B \rightarrow AB$ probíhající v kapalně fázi je homogenně katalyzovaná katalyzátorem K. Reakce probíhá podle mechanismu



Experimentem bylo zjištěno, že se jedná o meziprodukt van't Hoffova typu, kdy rychlostní konstanta reakce aktivovaného komplexu s látkou B k_2 je o více jak dva řády vyšší než zbylé dvě rychlostní konstanty. Vypočítejte hodnotu rychlostní konstanty k_1 , jestliže při celkové analytické koncentraci katalyzátoru $0,01 \text{ mol/dm}^3$ a počátečních koncentracích látky A $0,6 \text{ mol/dm}^3$ a látky B 5 mol/dm^3 40 % původního množství látky A zreagovalo za 200 minut. Objem systému je konstantní

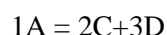
[Výsledek: $0,255 (\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3})^{-1} \cdot \text{min}^{-1}$]

Varianta D

1. V systému probíhá neelementární jednosměrná reakce $1A \rightarrow \text{produkty}$. Pokud byla počáteční koncentrace látky A byla $0,5 \text{ mol/dm}^3$, zreagovalo 80 % látky A za 20,3 minuty. V druhém experimentu byla počáteční koncentrace látky A $0,2 \text{ mol/dm}^3$. V tomto případě 80 % látky A zreagovalo za 42,25 minuty. Určete řád reakce vůči složce A a hodnotu rychlostní konstanty včetně rozměru u této jednosměrné reakce.

[Výsledek: 1,8; $0,2813(\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3})^{-0,8} \cdot \text{min}^{-1}$]

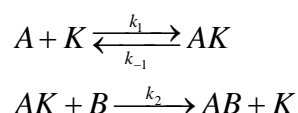
2. Jednosměrná reakce



je řádu 3 vzhledem k látce A. Při teplotě 20°C je hodnota rychlostní konstanty $0,6 (\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3})^{-2} \text{min}^{-1}$. Hodnota aktivační energie je 90 kJ/mol . Vypočítejte, za jak dlouho poklesne koncentrace látky A z hodnoty $c_A^0 = 0,25 \text{ mol/dm}^3$ na hodnotu $0,1 \text{ mol/dm}^3$ při teplotě 40°C . Hodnota aktivační energie je teplotně nezávislá.

[Výsledek: 6,62 minuty]

3. Reakce $A + B \rightarrow AB$ probíhající v kapalně fázi je homogenně katalyzovaná katalyzátorem K. Reakce probíhá podle mechanismu



Experimentem bylo zjištěno, že se jedná o meziprodukt Arrheniova typu, kdy rychlostní konstanta vratného rozkladu aktivovaného komplexu k_{-1} je o hodně vyšší než zbylé dvě rychlostní konstanty. Vypočítejte hodnotu rychlostní konstanty k_{-1} , jestliže při celkové analytické koncentraci katalyzátoru $0,01 \text{ mol/dm}^3$ a stejných hodnotách výchozích koncentrací látek A i B ve výši 5 mol/dm^3 je poločas reakce roven 10 dnům. Hodnoty rychlostních konstant jsou $0,5 (\text{mol/dm}^3)^{-1} \text{s}^{-1}$, v případě k_1 a $1,158 \cdot 10^{-2} (\text{mol/dm}^3)^{-1} \text{s}^{-1}$ v případě k_2 . Objem systému je konstantní

[Výsledek: $250,1 \text{ min}^{-1}$]

4. V systému probíhá fotochemická reakce $R_2I + 1,5H_2 \xrightarrow{h\nu} 2RH + HI$. Vlnová délka dopadajícího záření je 300 nm . Bylo zjištěno, že dodaná energie 2000 J vede k reakci $0,01503 \text{ molů}$ R_2I . Jaká je hodnota fotochemického výtěžku reakce? Jaký musí být za předpokladu stoprocentní účinnosti výkon energetického zdroje, aby se za 2 minuty rozložily 2 moly R_2I ?

[Výsledek: kvantový výtěžek = 3; $2,22 \text{ kW}$]