

### Άσκηση Δ4

Αντιδραστήρας διαλείποντος έργου (batch)

Αρχική συγκέντρωση αιθανόλης (A):  $[A_0] = 1 \frac{\text{mol}}{\text{l}}$

Αντίδραση:  $A + O_2 \rightarrow B$

t (s)	[A] (mol/s)	ln[A]	1/[A]
0	1	0	1
5	0,8	-0,22	1,25
10	0,67	-0,40	1,49
20	0,51	-0,67	1,96
30	0,39	-0,94	2,56
50	0,28	-1,27	3,57
70	0,21	-1,56	4,76
100	0,16	-1,83	6,25

Ο ρυθμός της αντίδρασης δίνεται από την εξίσωση:

$$r = -\frac{d[A]}{dt} = k \cdot [A]^x \quad (1)$$

Για να βρούμε ποια είναι η τάξη της αντίδρασης με την ολοκληρωτική μέθοδο, χρησιμοποιούμε την εις άτοπο απαγωγή: υποθέτουμε μία τάξη αντίδρασης και προσπαθούμε να δημιουργήσουμε μία γραμμική εξίσωση. Μετατρέπουμε τα πειραματικά δεδομένα για να ταιριάξουν στην εκάστοτε εξίσωση. Αν η γραφική παράσταση των δεδομένων είναι ευθεία γραμμή, τότε επιβεβαιώνεται η τάξη της αντίδρασης. Διαφορετικά, υποθέτουμε διαφορετική τάξη αντίδρασης.

Έστω ότι η αντίδραση είναι μηδενικής τάξης (x=0):

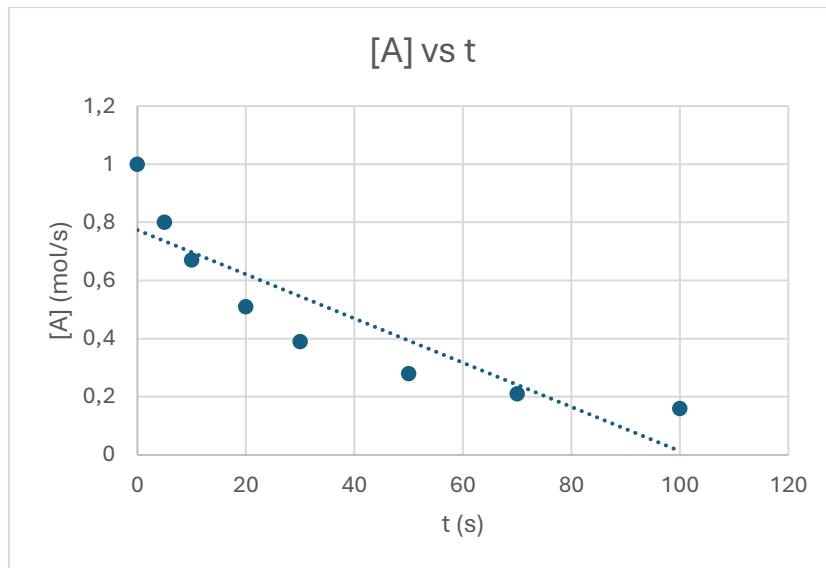
$$(1) \rightarrow -\frac{d[A]}{dt} = k \cdot [A]^0 = k \rightarrow [A] = -k \cdot t + c_1$$

Αρχική συνθήκη:  $t = 0 \rightarrow [A] = [A_0] \rightarrow c_1 = [A_0]$

Άρα:

$$[A] = [A_0] - kt$$

Κατασκευάζουμε, λοιπόν, την γραφική παράσταση  $[A]$  vs  $t$ .



Παρατηρούμε ότι τα δεδομένα δεν μπορούν να αναπαρασταθούν από μία ευθεία γραμμή, άρα η αντίδραση δεν είναι μηδενικής τάξης.

Έστω ότι η αντίδραση είναι πρώτης τάξης (x=1):

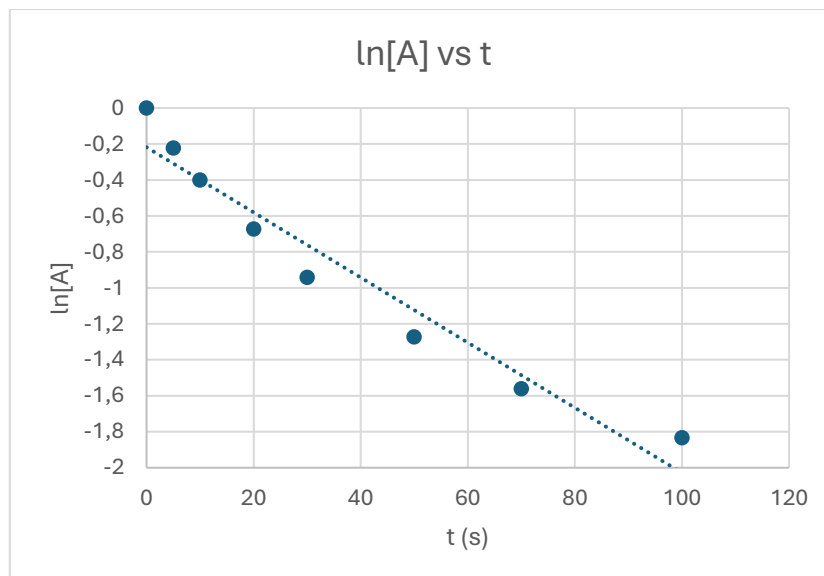
$$(1) \rightarrow -\frac{d[A]}{dt} = k \cdot [A]^1 = k \cdot [A] \rightarrow \ln[A] = -k \cdot t + c_2$$

Αρχική συνθήκη:  $t = 0 \rightarrow [A] = [A_0] \rightarrow c_2 = \ln[A_0]$

Άρα:

$$\ln[A] = \ln[A_0] - kt$$

Κατασκευάζουμε, λοιπόν, την γραφική παράσταση  $\ln[A]$  vs t.



Παρατηρούμε ότι τα δεδομένα δεν μπορούν να αναπαρασταθούν από μία ευθεία γραμμή, άρα η αντίδραση δεν είναι πρώτης τάξης.

Έστω ότι η αντίδραση είναι δεύτερης τάξης (x=2):

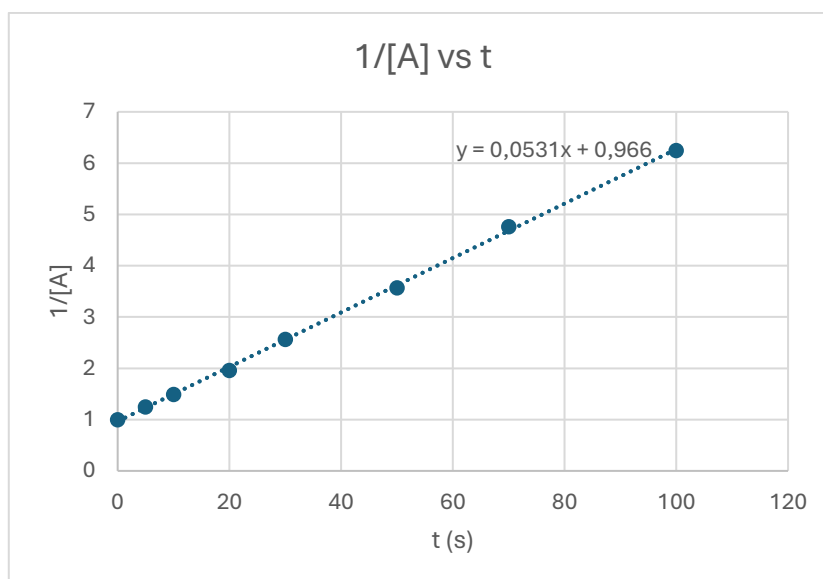
$$(1) \rightarrow -\frac{d[A]}{dt} = k \cdot [A]^2 \rightarrow 1/[A] = \kappa \cdot t + c_3$$

Αρχική συνθήκη:  $t = 0 \rightarrow [A] = [A_0] \rightarrow c_3 = 1/[A_0]$

Άρα:

$$\frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A_0]} + \kappa t$$

Κατασκευάζουμε, λοιπόν, την γραφική παράσταση  $1/[A]$  vs  $t$ .



Παρατηρούμε ότι τα δεδομένα μπορούν να αναπαρασταθούν από μία ευθεία γραμμή, άρα η αντίδραση είναι δεύτερης τάξης με κινητική σταθερά  $\kappa=0.0531$  l/mol s.