

Pravda o Snehulienke a siedmich trpaslíkoch - riešenie

Benko Ján · Prírodné vedy

07.05.2009



V [predošlej časti](#) sme sa dozvedeli do akých problémov sa Snehulienka dostala a ako ju Popolvár z toho vysekal. Keďže Popolvár tiež potrebuje naháňať publikácie, tak sa rozhodol zverejniť postup ako krásnu Snehulienku schladil.

Popolvár teda radí :

Jednoduchú následnú reakciu znázorňuje schéma (1). V tomto prípade sa obe reakcie riadia kinetikou prvého poriadku.



k_1 , k_2 sú príslušné rýchlostné konštanty

Úbytok koncentrácie látky A s časom vyjadruje rovnica (2).

$$-\frac{dc_A}{dt} = k_1 * c_A \quad (2)$$

Časovú závislosť koncentrácie medziproduktu (jedovatej látky B) vyjadruje rovnica (3)

$$\frac{dc_B}{dt} = k_1 * c_A - k_2 * c_B \quad (3)$$

Časovú závislosť prírastku koncentrácie konečného produktu vyjadruje rovnica (4)

$$\frac{dc_C}{dt} = k_2 * c_B \quad (4)$$

rovnica (4) sa dá integrovať priamo, pričom dostaneme rovnicu (5)

$$c_A = c_{A0} * e^{-k_1 * t} \quad (5)$$

Riešením diferenciálnych rovníc (3) a (4) dostaneme rovnice (6) a (7), z ktorých sa dá priamo vypočítať koncentrácia medziproduktu B a konečného produktu C v ľubovoľnom čase. *

$$c_B = c_{A0} \frac{k_1}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}) \quad (6)$$

$$c_C = c_{A0} \left(1 - \frac{k_2}{k_2 - k_1} e^{-k_1 t} + \frac{k_1}{k_2 - k_1} e^{-k_2 t} \right) \quad (7)$$

Čas, za ktorý dosiahne koncentrácia látky B maximum vypočítame z podmienky (8)

$$\frac{dc_B}{dt} = 0 \quad (8)$$

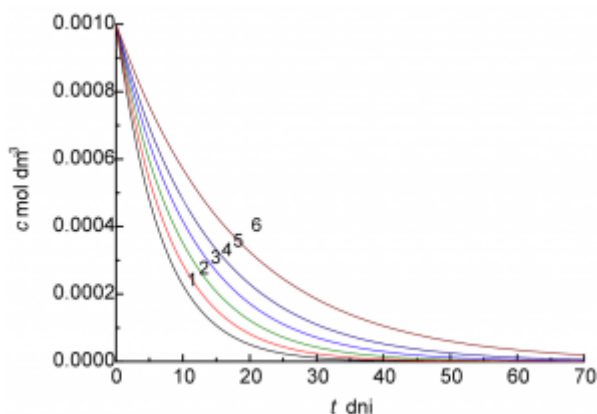
Deriváciou rovnice (6) a jej úpravou dostaneme rovnicu (9), z ktorej sa dá vypočítať čas, keď koncentrácia látky B dosiahne maximum.

$$t_{max} = \left(\ln \frac{k_1}{k_2} \right) (k_1 - k_2)^{-1} \quad (9)$$

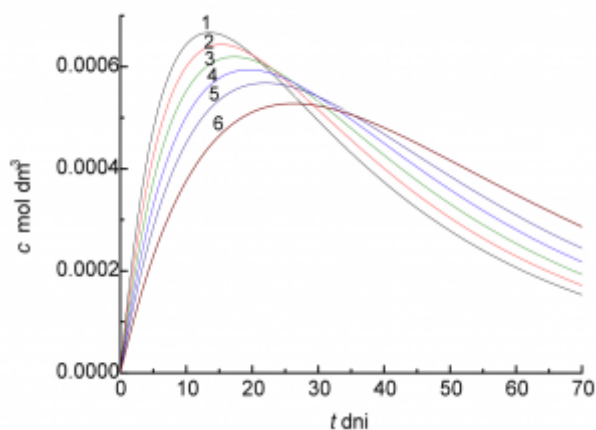
Dosadením rovnice (9) do rovnice (6) dostaneme maximálnu koncentráciu, ktorú medziprodukt B dosiahne v priebehu následnej reakcie, rovnica (10)

$$c_{Bmax} = c_{A0} \left(\frac{k_1}{k_2} \right)^{k_2 / (k_2 - k_1)} \quad (10)$$

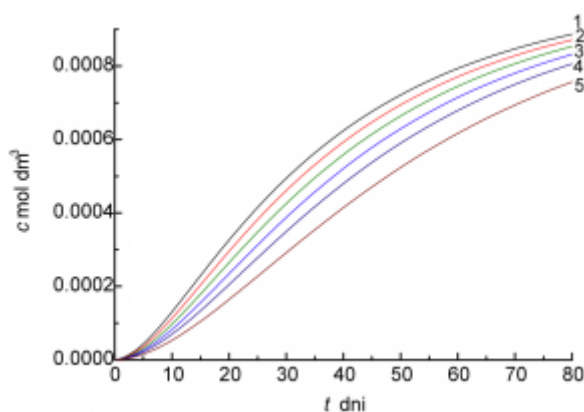
Z rovníc (5) - (7) sa vypočítali koncentrácie časové závislosti úbytku koncentrácie východiskovej látky A , koncentrácie medziproduktu B a koncentrácie konečného produktu C pri rôznych teplotách, tieto sú znázornené na obr. 1 - 3.



Obr. 1. Závislosť koncentrácie východiskovej látky A od času pri rôznych teplotách:
(1 - 37°C ; 2 - 36°C ; 3 - 35°C ; 4 - 34°C ; 5 - 33°C ; 6 - 31.5°C)



Obr. 2. Závislosť koncentrácie medziproduktu B od času pri rôznych teplotách:
(1 - 37°C ; 2 - 36°C ; 3 - 35°C ; 4 - 34°C ; 5 - 33°C ; 6 - 31.5°C)



Obr. 3. Závislosť koncentrácie konečného produktu B od času pri rôznych teplotách:
(1 - 37°C ; 2 - 36°C ; 3 - 35°C ; 4 - 34°C ; 5 - 33°C ; 6 - 31.5°C)

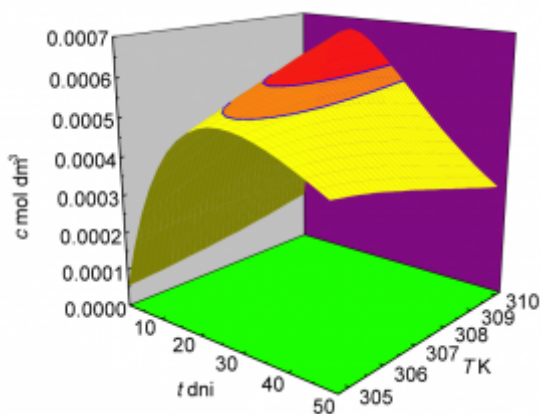
Z obr. 2 vidno, že s klesajúcou teplotou klesá aj maximálna koncentrácia, ktorú dosiahne medziprodukt B v priebehu reakcie.

Tabuľka 1- Hodnoty rýchlostných konštánt, koncentrácie východiskovej látky A, maximálnej koncentrácie medziproduktu B a koncentrácie výsledného produktu C v čase $t_{\max}$ pri rôznych teplotách

T	k_1	k_2	$c_A \cdot 10^4$	$c_{B\max} \cdot 10^4$	$c_C \cdot 10^4$	$t_{\max}$
[°C]	[d ⁻¹]	[d ⁻¹]	[mol * dm ⁻³]	[mol * dm ⁻³]	[mol * dm ⁻³]	[d]
37.0	0.150	0.0300	1.34	6.69	1.97	13.4
36.5	0.137	0.0294	1.41	6.57	2.02	14.3
36.0	0.126	0.0289	1.48	6.46	2.06	15.2
35.5	0.116	0.0284	1.56	6.33	2.11	16.1
35.0	0.106	0.0278	1.64	6.20	2.16	17.2
34.5	0.0966	0.0273	1.72	6.08	2.20	18.2
34.0	0.0883	0.0268	1.80	5.95	2.25	19.4
33.5	0.0807	0.0263	1.89	5.82	2.29	20.6
33.0	0.0738	0.0258	1.99	5.69	2.31	21.9

32.5	0.0675	0.0253	2.08	5.55	2.37	23.3
32.0	0.0617	0.0248	2.18	5.42	2.40	24.7
31.5	0.0564	0.0243	2.28	5.28	2.44	26.2

Závislosť koncentrácie látky B od teploty a času ilustruje trojrozmerný graf (obr. 4.)



Obr. 4. Závislosť koncentrácie medziproduktu B od teploty a času

červená oblasť – koncentrácií látky B , kde je smrteľne jedovatá

oranžová oblasť – koncentrácií látky B kde môže dojsť k trvalému poškodeniu zdravia

žltá oblasť – koncentrácií, kde je látka B neškodná

*Podrobné riešenie rovníc (3) a (4) sa dá nájsť v každej učebnici fyzikálnej chémie napr. V. Kellö a A. Tkáč, Fyzikálna chémia, Alfa, Bratislava 1977
