

Reakce n-tého řádu

Objemová konverze !!!!!!! Substitute

A $\xrightarrow{k_1}$ (řád n) \rightarrow B

		Pocatecni koncentrace	time_step
kn	0.3 min ⁻¹	A0	2 mMol l ⁻¹
řád n:	2	B0	0.5 mMol l ⁻¹

$v = d[x]/dt = -d[A]/dt \quad d[B]/dt = kn \cdot [A]**n = -d[A]/dt = kn \cdot [A]**n$

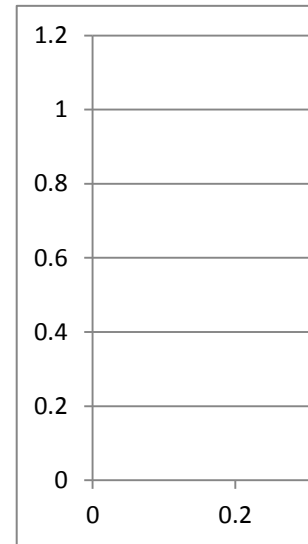
Numericke reseni:

$[x(t+dt)] = [x(t)] + dt \cdot kn \cdot [A_0 - X(t)]**n$

$[A(t+dt)] = [A(t)] - dt \cdot kn \cdot [A(t)]**n$

$[B(t+dt)] = [B(t)] + dt \cdot \{ kn \cdot [A(t)]**n \}$

t/ min Xm/M A/m M B/m M kontrola
0



Dif. Rovnice

$$v = \frac{d\xi}{dt} = \frac{d[A]}{\gamma_A dt} = k[A]^n = k([A]^0 + \gamma_A \xi)^n$$

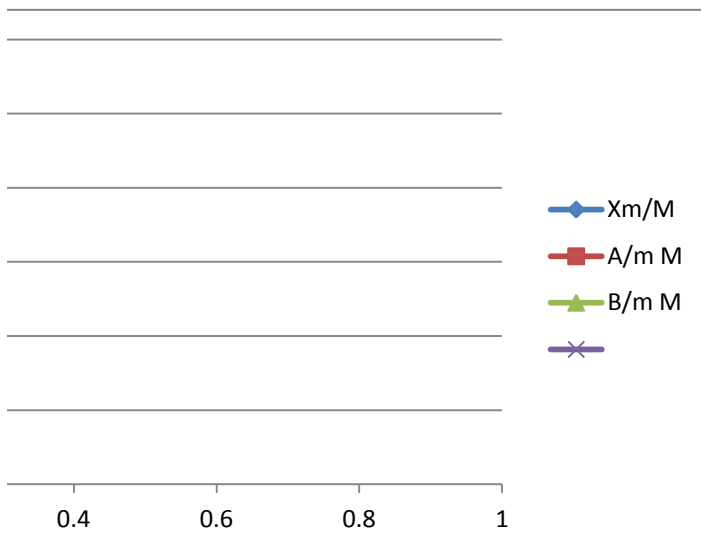
1.00E-02 min

Anal řešení:

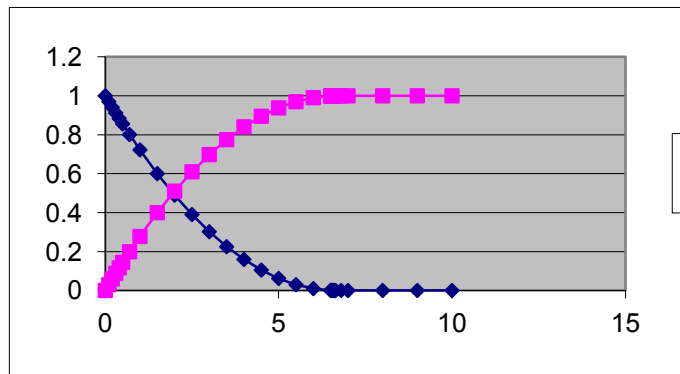
$$c_A^{1-n} - c_{A0}^{1-n} = a \cdot (n-1) \cdot k_c \cdot \tau$$

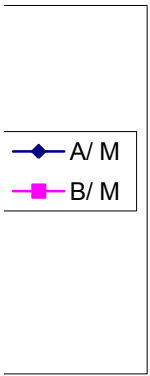
$$= kn \cdot ([A]_0 - [X])^{n-1}$$

$$= k1 \cdot (B_0 + X(t))^{n-1}$$



t/s	A/ M	B/ M
0	1	0
0.1	0.970203	0.029797
0.2	0.940856	0.059144
0.3	0.911959	0.088041
0.4	0.883513	0.116487
0.5	0.855517	0.144483
0.7	0.800876	0.199124
1	0.722293	0.277707
1.5	0.600328	0.399672
2	0.489625	0.510375
2.5	0.390184	0.609816
3	0.302006	0.697994
3.5	0.225094	0.774906
4	0.15945	0.84055
4.5	0.105077	0.894923
5	0.06198	0.93802
5.5	0.030167	0.969833
6	0.009655	0.990345
6.5	0.00049	0.99951
6.51	0.000424	0.999576
6.52	0.000362	0.999638
6.53	0.000305	0.999695
6.54	0.000253	0.999747
6.55	0.000205	0.999795
6.56	0.000162	0.999838
6.57	0.000124	0.999876
6.58	9.04E-05	0.99991
6.59	6.19E-05	0.999938
6.6	3.83E-05	0.999962
6.622	6.96E-06	0.999993
6.629	2.51E-06	0.999997
6.63	2.05E-06	0.999998
6.8	1.39E-07	1
7	3.55E-09	1
8	1.76E-09	1
9	5.03E-10	1
10	0	1





1. chemická rovnice (podmínkou je zanedbatelná koncentrace meziproductů)
2. zápis rychlostní rovnice v diferenciální formě (vč. substituce s použitím ζ)
3. numerické řešení vzhledem k ζ .
4. dopočet koncentrace reaktantů a produktů ze známosti ζ
5. kontrola koncentrací dle zákona zachování hmoty
6. finální grafické řešení