

1 Binarna reakcija



Naši reakciji vrli diferencialk par gre zraven.

Tol'ko neznank v njem nastopa, kot 'mamo enačb mi na voljo.

Za določitev hitrosti reakcije potrebujemo le koncentraciji $[A] = x_1$ in $[A^*] = x_2$, zato bo to sistem dveh enačb z dvema neznankama.

$$\dot{x}_1 = -px_1^2 + qx_1x_2 \quad (3)$$

$$\dot{x}_2 = px_1^2 - qx_1x_2 - rx_2 \quad (4)$$

1.1 Eksakten sistem

Vemo, da je za to reakcijo $p \gg q$, zato bo $x_2 \ll x_1$. Dejanske koncentracije reagentov ne poznamo, za samo dinamiko reakcije pa niti ni pomembna, lahko postavimo začetni pogoj $x_1(0) = 1$ in $x_2(0) = 0$. Takšen sistem enačb z začetnim pogojem sedaj lahko numerično integriramo. Zaradi velike razlike v absolutnih vrednosti p in q je ta problem tog, kar integratorju povzroča težave, saj mora računati z zelo majhnim korakov, čeprav nas zanima le rezultat v daljšem časovnem obdobju.

1.2 Približek stacionarnega stanja

Koncentracija vzbujenih molekul x_2 se sicer hitro spreminja, vendar je vseskozi zelo majhna v primerjavi z x_1 . Zato lahko te hitre in majhne spremembe zanemarimo in dodamo pogoj $\dot{x}_2 = 0$. To nam da pogoj

$$\dot{x}_2 = px_1^2 - qx_1x_2 - rx_2 = 0 \quad (5)$$

$$x_2 = \frac{px_1^2}{qx_1 + r} \quad (6)$$

Vstavi sedaj ta izraz v enačbo, tretjo povrsti.

Vse kar ostane je ena diferencialna enačba,

eno ima le neznanko, in to integrator obvlada.

$$\dot{x}_1 = -px_1^2 \left(1 - \frac{qx_1}{qx_1 + r} \right) = -px_1^2 \frac{r}{qx_1 + r} \quad (7)$$

2 Reakcija z več stopnjami

Glej, že nas čaka naloga, kjer treba bo več izračunat'.

Stopnje reakcija tri 'ma, in pet je neznank v njej neznanih.

Pet pa je tudi enačb, rešitev gotovo je možna.

A kje se v njej skriva hitrost z vodikom reakcije broma?

$$[\dot{\text{Br}}_2] = -k_1[\text{Br}_2] + k_2[\text{Br}]^2 - k_5[\text{H}][\text{Br}_2] \quad (8)$$

$$[\dot{\text{Br}}] = k_1[\text{Br}_2] - k_2[\text{Br}]^2 - k_3[\text{Br}][\text{H}_2] + k_4[\text{HBr}][\text{H}] + k_5[\text{H}][\text{Br}_2] \quad (9)$$

$$[\dot{\text{H}}_2] = -k_3[\text{Br}][\text{H}_2] + k_4[\text{HBr}][\text{H}] \quad (10)$$

$$[\dot{\text{H}}] = k_3[\text{Br}][\text{H}_2] - k_4[\text{HBr}][\text{H}] - k_5[\text{H}][\text{Br}_2] \quad (11)$$

$$[\dot{\text{HBr}}] = k_3[\text{Br}][\text{H}_2] - k_4[\text{HBr}][\text{H}] + k_5[\text{H}][\text{Br}_2] \quad (12)$$

*A fizik že ve kaj storiti, kako naj enačb vseh se reši,
vraga številčnega loti se najprej s približkom mirovnim.
Hitro gredo radikali, al' nikdar jih v zmesi ni dosti.
Lažji problem naš postane, ak' njih fluktuacij ne vid'mo.*

$$[\dot{\text{Br}}] = [\dot{\text{H}}] = 0 \quad (13)$$

$$[\dot{\text{Br}}] = k_1[\text{Br}_2] - k_2[\text{Br}]^2 - k_3[\text{Br}][\text{H}_2] + k_4[\text{HBr}][\text{H}] + k_5[\text{H}][\text{Br}_2] = 0 \quad (14)$$