Aufgabe und Lösung

Für die **Folgereaktion** (irreversibel, erster Ordnung) soll der Konzentrationsverlauf von P berechnet werden. $A \xrightarrow{k_1} P \xrightarrow{k_2} S$ Anfangsbedingung: $c_A(t=0)=c_{A0}$

$c_P(t=0)=0$

$c_S(t=0)=0$

I $\quad -r_A = -\frac{dc_A}{dt} = +k_1 c_A \qquad r_A = \frac{dc_A}{dt} = -k_1 c_A$

II $\quad r_P = \frac{dc_P}{dt} = k_1 c_A - k_2 c_P$

III $\quad r_S = \frac{dc_S}{dt} = k_2 c_P$

Mit den Anfangsbedingungen können die Grenzen festgelegt werden

Lösen der Gleichung I mit dem Verfahren *„Trennung der Variablen"*

$$\frac{dc_A}{dt} = -k_1 c_A \Leftrightarrow \frac{dc_A}{c_A} = -k_1 dt \Leftrightarrow \int_{c_{A0}}^{c_A(t')} \frac{dc_A}{c_A} = -\int_0^{t'} k_1 dt \Leftrightarrow \int_{c_{A0}}^{c_A(t')} \frac{dc_A}{c_A} = \ln(c_A)\Big|_{c_{A0}}^{c_A(t')} = -k_1 t'$$

Aufgabe und Lösung

Für die **Folgereaktion** (irreversibel, erster Ordnung) soll der Konzentrationsverlauf von P berechnet werden. $A \xrightarrow{k_1} P \xrightarrow{k_2} S$ Anfangsbedingung: $c_A(t=0)=c_{A0}$

$c_P(t=0)=0$

$c_S(t=0)=0$

I $\quad -r_A = -\frac{dc_A}{dt} = +k_1 c_A \qquad r_A = \frac{dc_A}{dt} = -k_1 c_A$

II $\quad r_P = \frac{dc_P}{dt} = k_1 c_A - k_2 c_P \quad \longrightarrow \quad r_P = \frac{dc_P}{dt} = k_1 c_{A0} e^{-k_1 t} - k_2 c_P$

inhom. lin. DGL 1. Ord.

III $\quad r_S = \frac{dc_S}{dt} = k_2 c_P$

$$\int_{c_{A0}}^{c_A(t')} \frac{dc_A}{c_A} = \ln(c_A)\Big|_{c_{A0}}^{c_A(t')} = -k_1 t'$$

$$c_A = c_A(t) = c_{A0} e^{-k_1 t}$$

$$\ln(c_A(t')) - \ln(c_{A0}) = -k_1 t' \Leftrightarrow \ln\left(\frac{c_A(t')}{c_{A0}}\right) = -k_1 t' \Leftrightarrow \frac{c_A(t')}{c_{A0}} = e^{-k_1 t'} \Leftrightarrow c_A(t') = c_{A0} e^{-k_1 t'}$$

$\frac{dc_P}{dt} = k_1 c_{A0} e^{-k_1 t} - k_2 c_P$ **inhomogene lineare DGL 1. Ordnung**

Inhomogenität: Ein Term in der Gleichung, der nicht die gesuchte Funktion oder ihre Ableitung enthält.

Lineare DGL: Die Funktion sowie alle Ableitungen gehen mit dem Grad 1 (Exponenten=1) ein.

1. Ordnung: In der DGL ist die höchste Ableitung ist die erste Ableitung

allgemeine Lösung einer inhomog. lin. DGL 1. Ord.

$$\frac{dy}{dx} = y' = a(x)\, y + S(x)$$

Z mit der Anfangsbestimmung berechnen

Lösung: $y = e^{\int a(x)dx}\left[\int e^{-\int a(x)dx} S(x)dx + Z\right]$

unbestimmte Integrale ohne Integrationskonstante!!!!

$$\frac{dy}{dx} = y' = a(x)\, y + S(x) \qquad y = e^{\int a(x)dx}\left[\int e^{-\int a(x)dx} S(x)dx + Z\right]$$

$$\frac{dc_P}{dt} = k_1 c_{A0} e^{-k_1 t} - k_2 c_P \qquad x = t,\quad y = c_P,\quad a(x) = -k_2,\quad S(x) = k_1 c_{A0} e^{-k_1 t}$$

Anfangsbedingung:

$c_A(t=0)=c_{A0}$

$c_P(t=0)=0$

$c_S(t=0)=0$

$$c_P = e^{\int -k_2 dt}\left[\int e^{-\int -k_2 dt} k_1 c_{A0} e^{-k_1 t} dt + Z\right]$$

$$c_P = e^{-k_2 t}\left[\int e^{k_2 t} k_1 c_{A0} e^{-k_1 t} dt + Z\right] = e^{-k_2 t}\left[\int k_1 c_{A0} e^{(k_2 - k_1)t} dt + Z\right]$$

Nur für $k_1 \neq k_2$! $\quad c_P = e^{-k_2 t}\left[\frac{c_{A0} k_1}{k_2 - k_1} e^{(k_2 - k_1)t} + Z\right]$

Um Z zu berechnen $c_P(t=0)=0$

Nur für $k_1 \neq k_2$! $\quad c_P = e^{-k_2 t}\left[\frac{c_{A0} k_1}{k_2 - k_1} e^{(k_2 - k_1)t} + Z\right]$

Um Z zu berechnen $c_P(t=0)=0$

$$c_P(t=0) = 0 = 1\left[\frac{c_{A0} k_1}{k_2 - k_1} 1 + Z\right] \longrightarrow Z = -c_{A0} \frac{k_1}{k_2 - k_1}$$

$$c_P = e^{-k_2 t}\left[\frac{c_{A0} k_1}{k_2 - k_1} e^{(k_2 - k_1)t} - \frac{c_{A0} k_1}{k_2 - k_1}\right]$$

$$c_P = c_{A0} \frac{k_1}{k_2 - k_1}\left[e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}\right]$$

Nur für $k_1 = k_2$! $\quad c_P = e^{-k_2 t}\left[\int k_1 c_{A0} e^{(k_2 - k_1)t} dt + Z\right] = e^{-k_2 t}\left[k_1 c_{A0} \int dt + Z\right]$

Nur für $k_1 = k_2$! $\quad c_P = e^{-k_2 t}\left[\int k_1 c_{A0} e^{(k_2 - k_1)t} dt + Z\right] = e^{-k_2 t}\left[k_1 c_{A0} \int dt + Z\right]$

$$c_P = e^{-k_2 t}\left[k_1 c_{A0} t + Z\right]$$

Anfangsbedingung:

$$c_P(t=0) = 0 = e^{-k_2 t}\left[k_1 c_{A0} 0 + Z\right]$$

$c_A(t=0)=c_{A0}$

$c_P(t=0)=0$

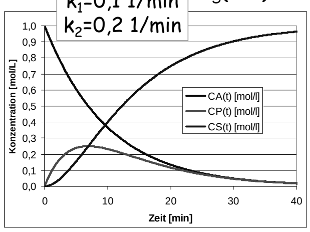
$c_S(t=0)=0$

$\Rightarrow Z = 0$

Nur für $k_1 = k_2$! $\quad c_P = k_1 c_{A0} t e^{-k_2 t}$

k_1=0,1 1/min

k_2=0,2 1/min



Nur für $k_1 \neq k_2$!

$$c_P = c_{A0} \frac{k_1}{k_2 - k_1}\left[e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}\right]$$

Aufgabe und Lösung

Für die folgende Reaktion (irreversibel, zweiter Ordnung) soll der Konzentrationsverlauf von P berechnet werden. $A + A \xrightarrow{k} P$

<u>Anfangsbedingung:</u>

$c_A(t=0)=c_{A0}$

$c_P(t=0)=0$

$$-r_A = -\frac{dc_A}{dt} = +kc_A^2 \quad \Longleftrightarrow \quad r_A = \frac{dc_A}{dt} = -kc_A^2$$

Lösen der Gleichung mit dem Verfahren *„Trennung der Variablen"*

$$\frac{dc_A}{dt} = -kc_A^2 \Leftrightarrow \frac{dc_A}{c_A^2} = -kdt \Leftrightarrow \int \frac{dc_A}{c_A^2} = -\int kdt \Leftrightarrow \int_{c_{A0}}^{c_A(t')} \frac{dc_A}{c_A^2} = -\int_0^{t'} kdt$$

$$\int_{c_{A0}}^{c_A(t')} \frac{dc_A}{c_A^2} = -\frac{1}{c_A}\Bigg|_{c_{A0}}^{c_A(t')} = -kt' = -\left(\frac{1}{c_A(t')} - \frac{1}{c_{A0}}\right) \Leftrightarrow kt' = \frac{1}{c_A(t')} - \frac{1}{c_{A0}} \Leftrightarrow$$

$$kt' + \frac{1}{c_{A0}} = \frac{1}{c_A(t')} \Leftrightarrow c_A(t') = \frac{1}{kt' + \dfrac{1}{c_{A0}}} \Leftrightarrow \boxed{c_A(t') = \frac{c_{A0}}{c_{A0}kt' + 1}}$$

Wie sieht der Konzentrationsverlauf einer Reaktion erster und einer Reaktion zweiter Ordnung aus (irreversibel!)?