

SCIENZA
DEI MATERIALI

Chimica Fisica



Lezione XIII
Integrazione diretta

Dr. Fabio Mavelli

Dipartimento di Chimica
Università degli Studi di Bari





Risolvere analiticamente il sistema ODE è possibile solo in pochi casi semplici. I metodi che possono essere utilizzati sono i seguenti:

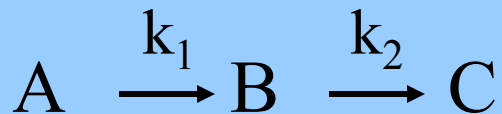
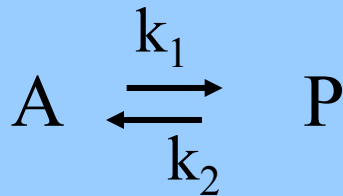
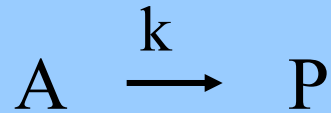
- integrazione diretta,
- metodo delle matrici
- metodo delle trasformate di Laplace,

Integrazione Diretta

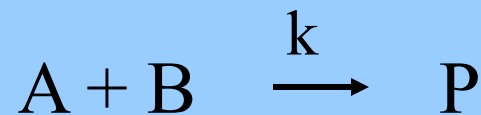
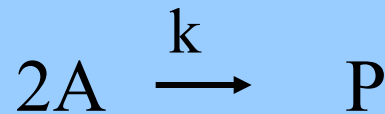


Verranno analizzati i seguenti Meccanismi:

Monomolecolari



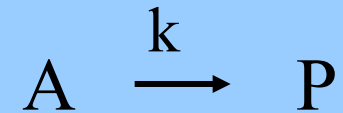
Bimolecolari



Integrazione diretta



**Reazione
Monomolecolare**



$$r = k[A]$$

Sistema ODE:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d[A]}{dt} = -k[A] \\ \frac{d[P]}{dt} = +k[A] \end{array} \right.$$

Legge di conservazione:

$$[A]_0 + [P]_0 = [A] + [P]$$

Reazione: $A \rightarrow P$



Il sistema da risolvere diventa:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A]$$

$$[P] = [P]_0 + ([A]_0 - [A])$$

L'unica equazione differenziale può essere facilmente risolta separando le variabili:

$$\frac{d[A]}{[A]} = -k dt$$

ed integrando fra i relativi valori della variabile indipendente t (tempo) e la variabile dipendente $[A]$ (concentrazione):

$$\int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{[A]} = -k \int_{t_0}^t dt$$

Reazione: $A \rightarrow P$



$$\ln\left(\frac{[A]}{[A]_0}\right) = -k(t - t_0)$$

Passando agli esponenziali ed assumendo $t_0=0$ si ottiene:

$$[A] = [A]_0 \exp(-kt)$$

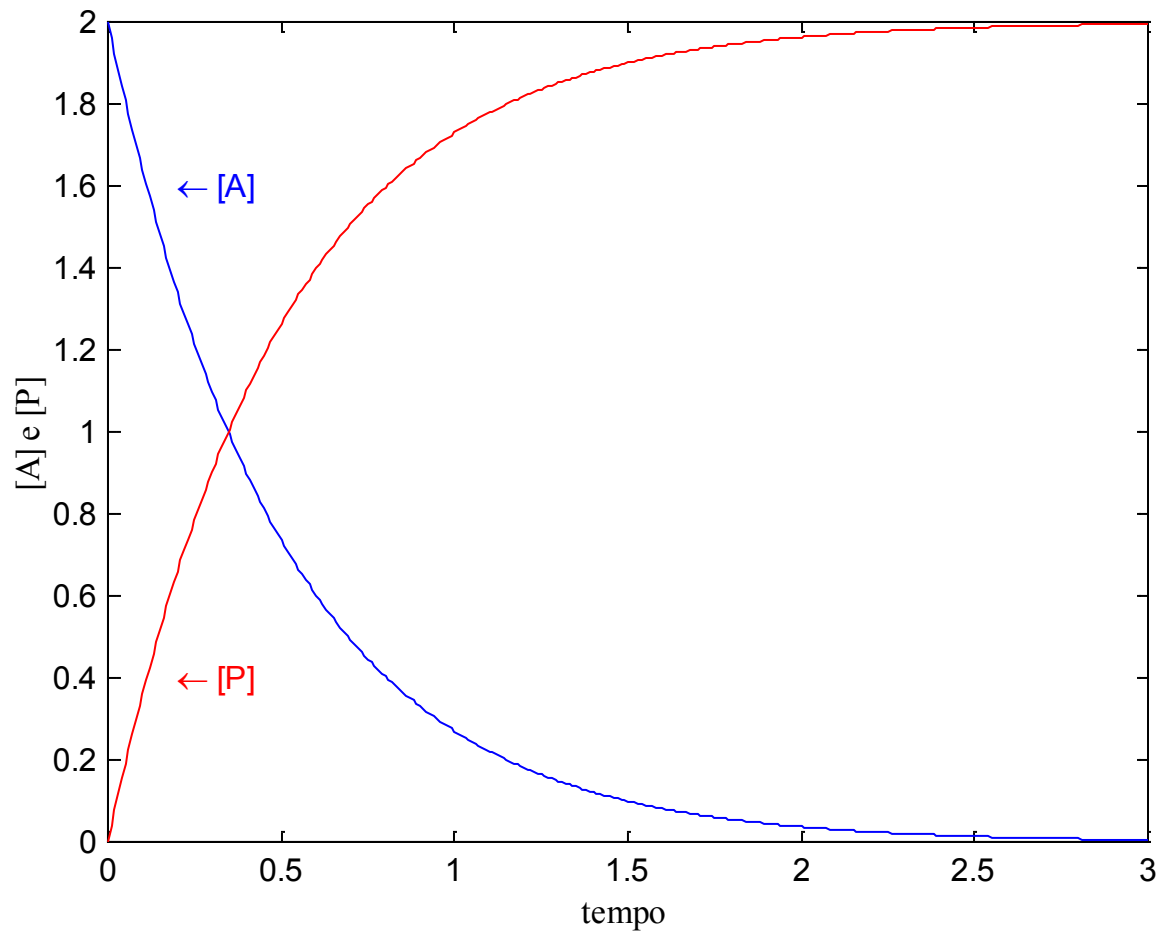
che sostituita nell'equazione di conservazione da l'andamento di $[P]$ in funzione del tempo:

$$[P] = [P]_0 + [A]_0 (1 - \exp(-kt))$$

Reazione: $A \rightarrow P$: plot c-t



Grafico c-t di un decadimento del 1° ordine



$$[A]_0 = 2.0$$

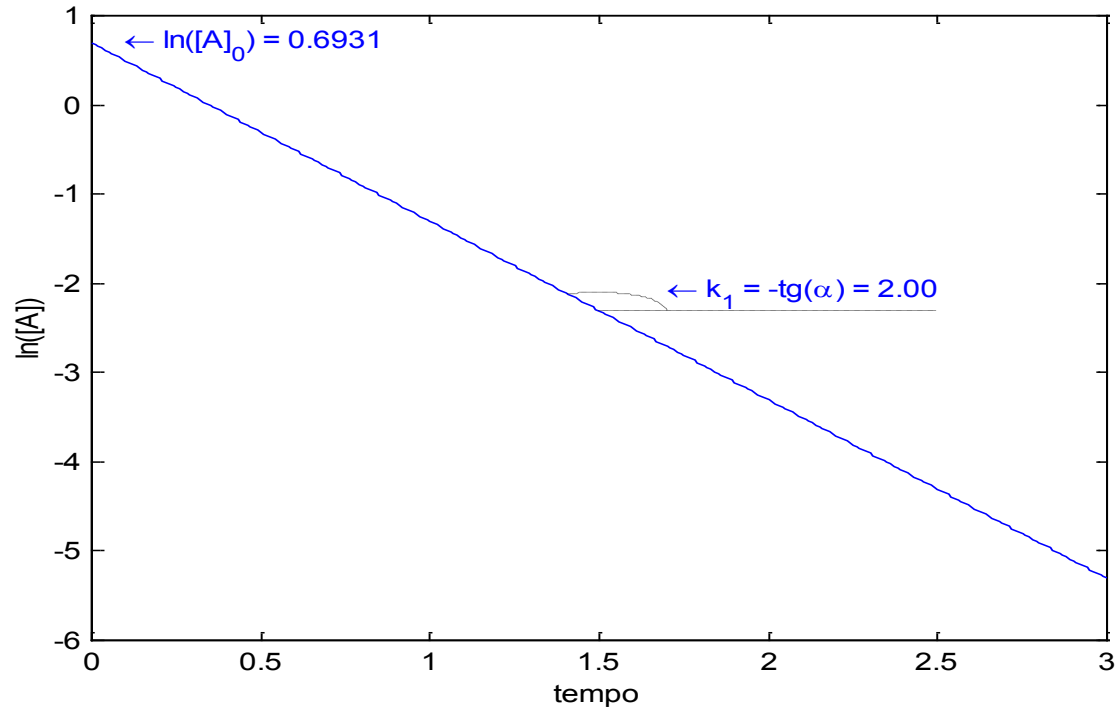
$$k_1 = 2.0$$

Reazione: $A \rightarrow P$: plot c-t



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

Grafico c-t di un decadimento del 1° ordine



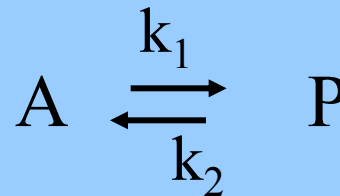
$$[A]_0 = 2.0$$

$$k_1 = 2.0$$

Reazione: $A \rightleftharpoons P$



**Reazione
Monomolecolare
Reversibile**



$$r_1 = k_1[A]$$

$$r_2 = k_2[P]$$

Sistema ODE:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d[A]}{dt} = -k_1[A] + k_2[P] \\ \frac{d[P]}{dt} = +k_1[A] - k_2[P] \end{array} \right.$$

Legge di conservazione:

$$[A]_0 + [P]_0 = [A] + [P]$$

Reazione: $A \rightleftharpoons P$



Ricavando $[P]$ in funzione di $[A]$ dall'eq. di conservazione della massa e sostituendo nell'equazione differenziale di $[A]$ il sistema da risolvere diventa:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k_1[A] + k_2(C_0 - [A])$$

$$[P] = ([A]_0 + [P]_0) - [A] = C_0 - [A]$$

ove si è posto $C_0 = [A]_0 + [P]_0$. L'equazione differenziale può essere riscritta:

$$\frac{d[A]}{dt} = (k_1 + k_2) \left(\frac{k_2 C_0}{(k_1 + k_2)} - [A] \right)$$

e ponendo m uguale ad:

$$m = \frac{k_2 C_0}{(k_1 + k_2)}$$

Reazione: $A \rightleftharpoons P$



risolta separando le variabili

$$\frac{d[A]}{(m - [A])} = (k_1 + k_2) dt$$

Integrando ambo i membri

$$\int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{(m - [A])} = \int_0^t (k_1 + k_2) dt$$

si ottiene:

$$-\ln\left(\frac{m - [A]}{m - [A]_0}\right) = (k_1 + k_2)t$$

Passando agli esponenziali

$$[A] = m - (m - [A]_0)e^{-(k_1 + k_2)t}$$

e ricordando la definizione di m e di C_0 si ha:

Reazione: $A \rightleftharpoons P$



$$[A] = \frac{k_2 ([A]_0 + [P]_0)}{(k_1 + k_2)} - \left(\frac{k_2 ([A]_0 + [P]_0)}{(k_1 + k_2)} - [A]_0 \right) \exp[-(k_1 + k_2)t]$$

che permette di ottenere $[A]$ in funzione del tempo e delle concentrazioni iniziali:

$$[A] = \frac{k_2 ([A]_0 + [P]_0)}{(k_1 + k_2)} - \left(\frac{\cancel{k_2 [A]_0} + k_2 [P]_0 - k_1 [A]_0 - \cancel{k_2 [A]_0}}{(k_1 + k_2)} \right) \exp[-(k_1 + k_2)t]$$

si ottiene:

$$[A] = \frac{[A]_0 + [P]_0}{(k_1 + k_2)} \left\{ k_2 + \left(k_1 \frac{[A]_0}{[A]_0 + [P]_0} - k_2 \frac{[P]_0}{[A]_0 + [P]_0} \right) \exp[-(k_1 + k_2)t] \right\}$$

Reazione: $A \rightleftharpoons P$



Ottenuta la concentrazione di A in funzione del tempo;

$$[A] = \frac{[A]_0 + [P]_0}{(k_1 + k_2)} \left\{ k_2 + \left(k_1 \frac{[A]_0}{[A]_0 + [P]_0} - k_2 \frac{[P]_0}{[A]_0 + [P]_0} \right) \exp[-(k_1 + k_2)t] \right\}$$

[P] può essere ricavata dall'equazione di conservazione della massa:

$$\begin{aligned} [P] &= ([A]_0 + [P]_0) - [A] = \\ &= \frac{[A]_0 + [P]_0}{(k_1 + k_2)} \left\{ k_1 - \left(k_1 \frac{[A]_0}{[A]_0 + [P]_0} - k_2 \frac{[P]_0}{[A]_0 + [P]_0} \right) \exp[-(k_1 + k_2)t] \right\} \end{aligned}$$

Reazione: $A \rightleftharpoons P$



Se $[P]_0 = 0$, ossia non è presente del prodotto al tempo 0, le espressioni delle concentrazioni di A e P risultano molto semplificate:

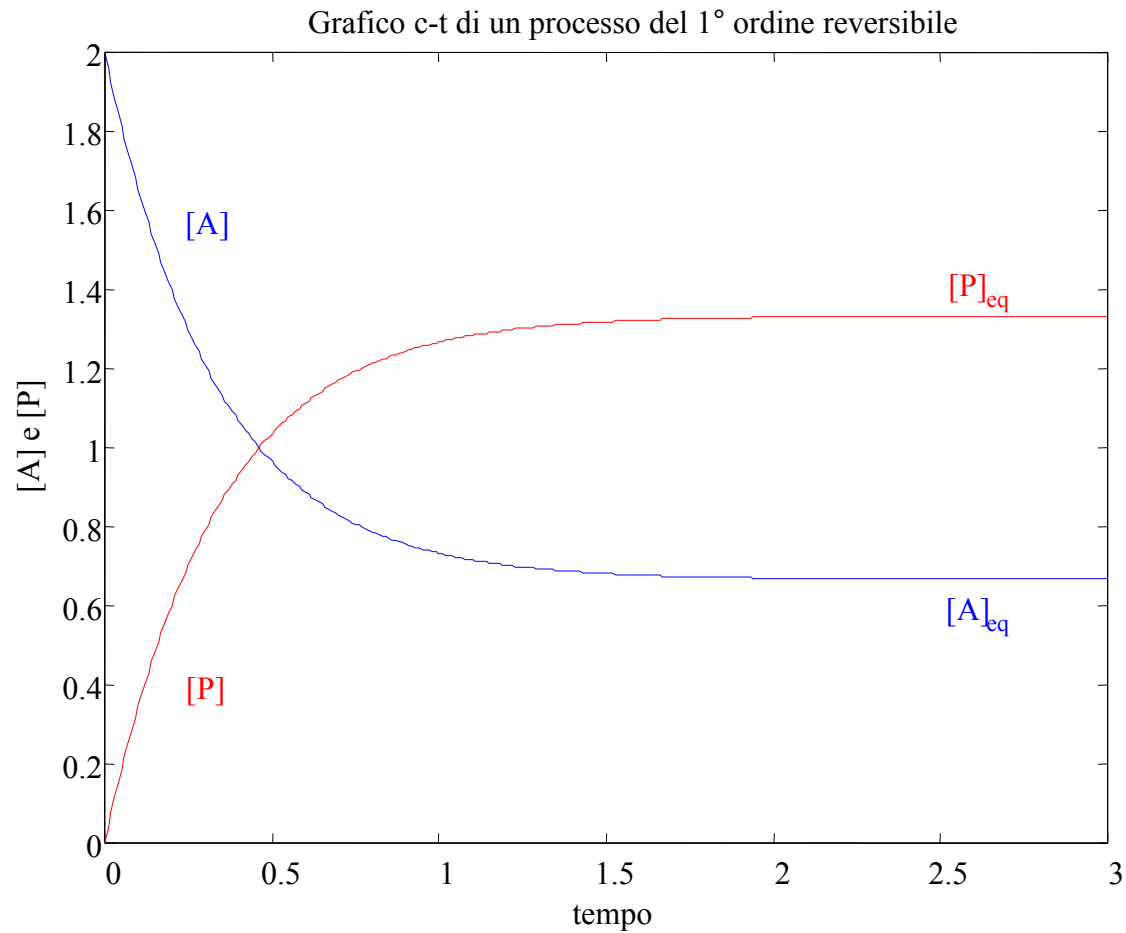
$$[A] = [A]_0 \frac{k_1}{(k_1 + k_2)} \left\{ \frac{k_2}{k_1} + \exp[-(k_1 + k_2)t] \right\}$$

$$[P] = [A]_0 \frac{k_1}{(k_1 + k_2)} \left\{ 1 - \exp[-(k_1 + k_2)t] \right\}$$

Reazione $A \rightleftharpoons P$: plot c-t



$$\begin{aligned} [A]_0 &= 2.0 \\ k_1 &= 2.0 \\ k_2 &= 1.0 \end{aligned}$$



Reazione: $A \rightleftharpoons P$



Poiché il processo è reversibile, i valori delle concentrazioni di equilibrio possono essere ricavati come il limite per $t \rightarrow \infty$ delle concentrazioni $[A]$ e $[P]$:

$$[A]_{\text{eq}} = \lim_{t \rightarrow \infty} [A] = \frac{[A]_0 + [P]_0}{(k_1 + k_2)} k_2$$

$$[P]_{\text{eq}} = \lim_{t \rightarrow \infty} [P] = \frac{[A]_0 + [P]_0}{(k_1 + k_2)} k_1$$

Reazione: $A \rightleftharpoons P$



Facendo il rapporto fra le concentrazioni di equilibrio di $[P]_{\text{eq}}$ e $[A]_{\text{eq}}$ si ottiene l'espressione della costante di equilibrio come rapporto delle costanti cinetiche della reazione diretta k_1 ed inversa k_2 :

$$K_{\text{eq}} = \frac{[P]_{\text{eq}}}{[A]_{\text{eq}}} = \frac{k_1}{k_2}$$

Si noti inoltre come all'equilibrio le velocità della reazione diretta ed inversa siano uguali fra loro:

$$r_1 = k_1 [A]_{\text{eq}} = k_1 \frac{[A]_0 + [P]_0}{(k_1 + k_2)} k_2 = k_2 [P]_{\text{eq}} = r_2$$

Reazione: $A \rightleftharpoons P$



L'uguaglianza fra le velocità della reazione diretta ed inversa determina l'azzeramento delle derivate della concentrazione del reagente e del prodotto:

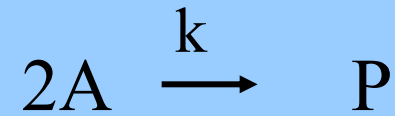
$$\frac{d[A]_{\text{eq}}}{dt} = -k_1[A]_{\text{eq}} + k_2[P]_{\text{eq}} = 0$$
$$\frac{d[P]_{\text{eq}}}{dt} = +k_1[A]_{\text{eq}} - k_2[P]_{\text{eq}} = 0$$

ossia i valori delle concentrazioni di equilibrio, una volta raggiunti, non variano nel tempo.

Reazione: $2A \rightarrow P$



Reazione Bimolecolare



$$r = k[A]^2$$

Sistema ODE:

$$\frac{d[A]}{dt} = -2k[A]^2$$

$$\frac{d[P]}{dt} = +k[A]^2$$

Legge di conservazione:

$$\frac{[A]_0}{2} + [P]_0 = \frac{[A]}{2} + [P]$$

Reazione: $2A \rightarrow P$



Il sistema da risolvere diventa:

$$\frac{d[A]}{dt} = -2k[A]^2$$

$$[P] = [P]_0 + \frac{([A]_0 - [A])}{2}$$

L'unica equazione differenziale può essere facilmente risolta separando le variabili:

$$\frac{d[A]}{[A]^2} = -2kdt$$

ed integrando fra i relativi valori della variabile indipendente t (tempo) e la variabile dipendente $[A]$ (concentrazione):

$$\int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{[A]^2} = -2k \int_{t_0}^t dt$$

Reazione: $2A \rightarrow P$



$$-\left(\frac{1}{[A]} - \frac{1}{[A]_0}\right) = -k(t - t_0)$$

Assumendo $t_0=0$ si ottiene $[A]$ in funzione di t e di $[A]_0$:

$$[A] = \frac{[A]_0}{1 + [A]_0 2kt}$$

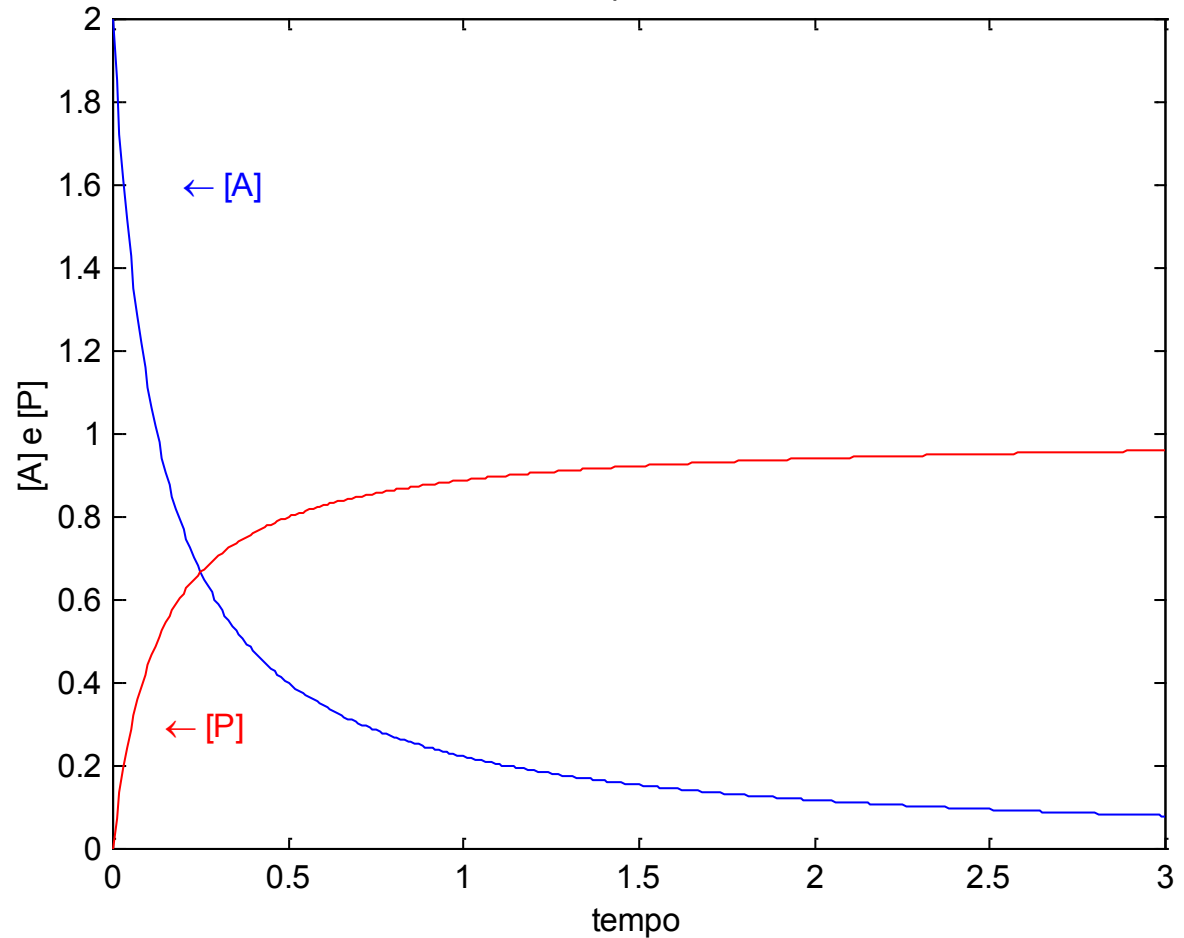
che sostituita nell'equazione di conservazione da l'andamento di $[P]$ in funzione del tempo e delle concentrazioni iniziali:

$$[P] = [P]_0 + \frac{[A]_0}{2} \left(1 - \frac{1}{1 + [A]_0 2kt}\right) = [P]_0 + \frac{[A]_0}{2} \left(\frac{[A]_0 2kt}{1 + [A]_0 2kt}\right)$$

Reazione: $2A \rightarrow P$: plot c-t



Grafico c-t del processo $2A \rightarrow P$



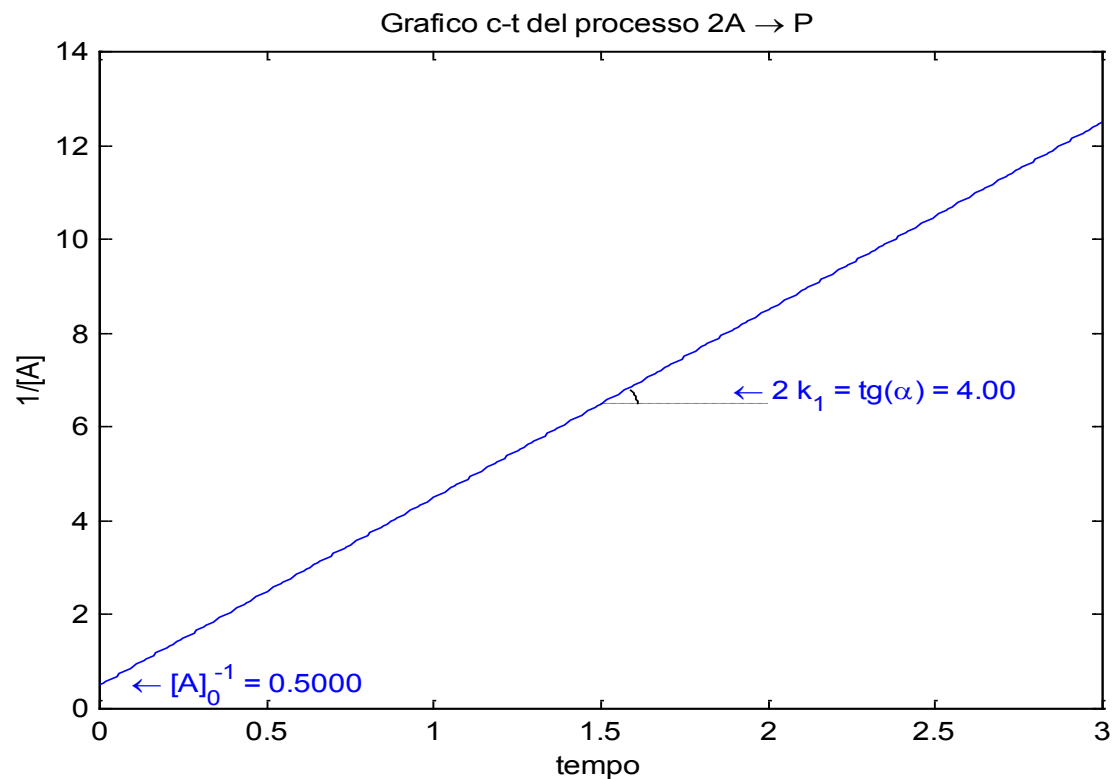
$$[A]_0 = 2.0$$
$$k = 2.0$$

Reazione $2A \rightarrow P$: plot c-t



$$\frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + 2kt$$

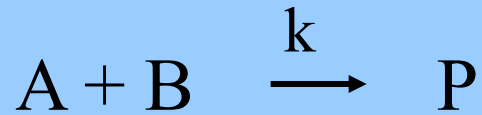
$$[A]_0 = 2.0$$
$$k = 2.0$$



Reazione $A+B \rightarrow P$



Reazione Bimolecolare



$$r = k[A][B]$$

Sistema ODE:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d[A]}{dt} = -k[A][B] \\ \frac{d[B]}{dt} = -k[A][B] \\ \frac{d[P]}{dt} = +k[A][B] \end{array} \right.$$

Leggi di conservazione:

$$[A]_0 + [P]_0 = [A] + [P]$$

$$[B]_0 + [P]_0 = [B] + [P]$$

Reazione $A+B \rightarrow P$



Sottraendo membro a membro le due leggi di conservazione se ne può ottenere una terza in A e B:

$$[A]_0 + [P]_0 = [A] + [P] \quad \ominus$$

$$[B]_0 + [P]_0 = [B] + [P]$$

$$[A]_0 - [B]_0 = [A] - [B]$$

Quindi è possibile ottenere due espressioni di [P] ed [B] in funzione di [A] e delle concentrazioni iniziali

$$[B] = [B]_0 - ([A]_0 - [A])$$

$$[P] = [P]_0 + ([A]_0 - [A])$$

Reazione $A+B \rightarrow P$



Definendo ($\Delta_{BA} = [B_0] - [A_0]$) e sostituendo l'espressione di $[B]$ nell'eq. diff. di $[A]$ il sistema ODE viene ridotto ad un'unica equazione differenziale che può essere risolta separando le variabili:

$$\begin{aligned}\frac{d[A]}{dt} &= -k[A](\Delta_{BA} + [A]) \\ [B] &= \Delta_{BA} + [A] \\ [P] &= [P]_0 + ([A]_0 - [A])\end{aligned}$$

$$\frac{d[A]}{[A](\Delta_{BA} + [A])} = -kdt$$

$$\int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{[A](\Delta_{BA} + [A])} = - \int_0^t kdt = -kt$$

Si noti come se $\Delta_{AB} = 0$ (ossia $[B_0] = [A_0]$) allora l'equazione si riduce al caso precedente

$$\frac{d[A]}{[A]^2} = -kdt$$

Reazione: $A+B \rightarrow P$



L'equazione può essere risolta scomponendo la frazione somma nel rapporto di due addendi:

$$\frac{1}{[A](\Delta_{BA} + [A])} = \frac{a}{[A]} + \frac{b}{\Delta_{BA} + [A]}$$

e effettuando la somma:

$$\frac{a}{[A]} + \frac{b}{\Delta_{BA} + [A]} = \frac{a(\Delta_{BA} + [A]) + b[A]}{[A](\Delta_{BA} + [A])} = \frac{a\Delta_{BA} + (a+b)[A]}{[A](\Delta_{BA} + [A])}$$

e ricavando i valori di a e b in modo che l'uguaglianza resti verificata:

$$\frac{1}{[A](\Delta_{BA} + [A])} = \frac{a\Delta_{BA} + (a+b)[A]}{[A](\Delta_{BA} + [A])} \Rightarrow \begin{cases} a\Delta_{BA} = 1 \\ a+b = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a = \frac{1}{\Delta_{BA}} \\ b = -a = \frac{-1}{\Delta_{BA}} \end{cases}$$

Reazione: $A+B \rightarrow P$



$$\frac{1}{[A](\Delta_{BA} + [A])} = \frac{1}{\Delta_{BA}} \left(\frac{1}{[A]} - \frac{1}{\Delta_{BA} + [A]} \right)$$

Sostituendo nel membro di sinistra dell'equazione:

$$\int_{[A]}^{[A]_0} \frac{d[A]}{[A](\Delta_{BA} + [A])} = \int_{[A]}^{[A]_0} \frac{1}{\Delta_{BA}} \left(\frac{1}{[A]} - \frac{1}{\Delta_{BA} + [A]} \right) d[A] = -kt$$

l'integrale può essere risolto scomponendolo in due termini:

$$\int_{[A]}^{[A]_0} \frac{d[A]}{[A](\Delta_{BA} + [A])} = \frac{1}{\Delta_{BA}} \left\{ \int_{[A]}^{[A]_0} \frac{d[A]}{[A]} + \int_{[A]}^{[A]_0} \frac{-d[A]}{(\Delta_{BA} + [A])} \right\} = -kt$$

Reazione: $A+B \rightarrow P$



che possono essere
facilmente integrati:

$$\ln \frac{[A]}{[A]_0} - \ln \frac{(\Delta_{BA} + [A])}{(\Delta_{BA} + [A]_0)} = -\Delta_{BA} kt$$

riarrangiati:

$$\ln \frac{[A]}{(\Delta_{BA} + [A])} - \ln \frac{[A]_0}{(\Delta_{BA} + [A]_0)} = -\Delta_{BA} kt$$

$$\ln \frac{[A]}{(\Delta_{BA} + [A])} = \ln \frac{[A]_0}{(\Delta_{BA} + [A]_0)} - \Delta_{BA} kt$$

e passando agli esponenziali:

$$\frac{[A]}{(\Delta_{BA} + [A])} = \frac{[A]_0}{(\Delta_{BA} + [A]_0)} \exp(-\Delta_{BA} kt)$$

Reazione: $A+B \rightarrow P$



ed infine si ottiene:

$$[A] = \frac{\frac{\Delta_{BA} [A]_0}{(\Delta_{BA} + [A]_0)} \exp(-\Delta_{BA} kt)}{1 - \frac{[A]_0}{(\Delta_{BA} + [A]_0)} \exp(-\Delta_{BA} kt)}$$

che può essere semplificata ricordando che $\Delta_{AB} = [B]_0 - [A]_0$

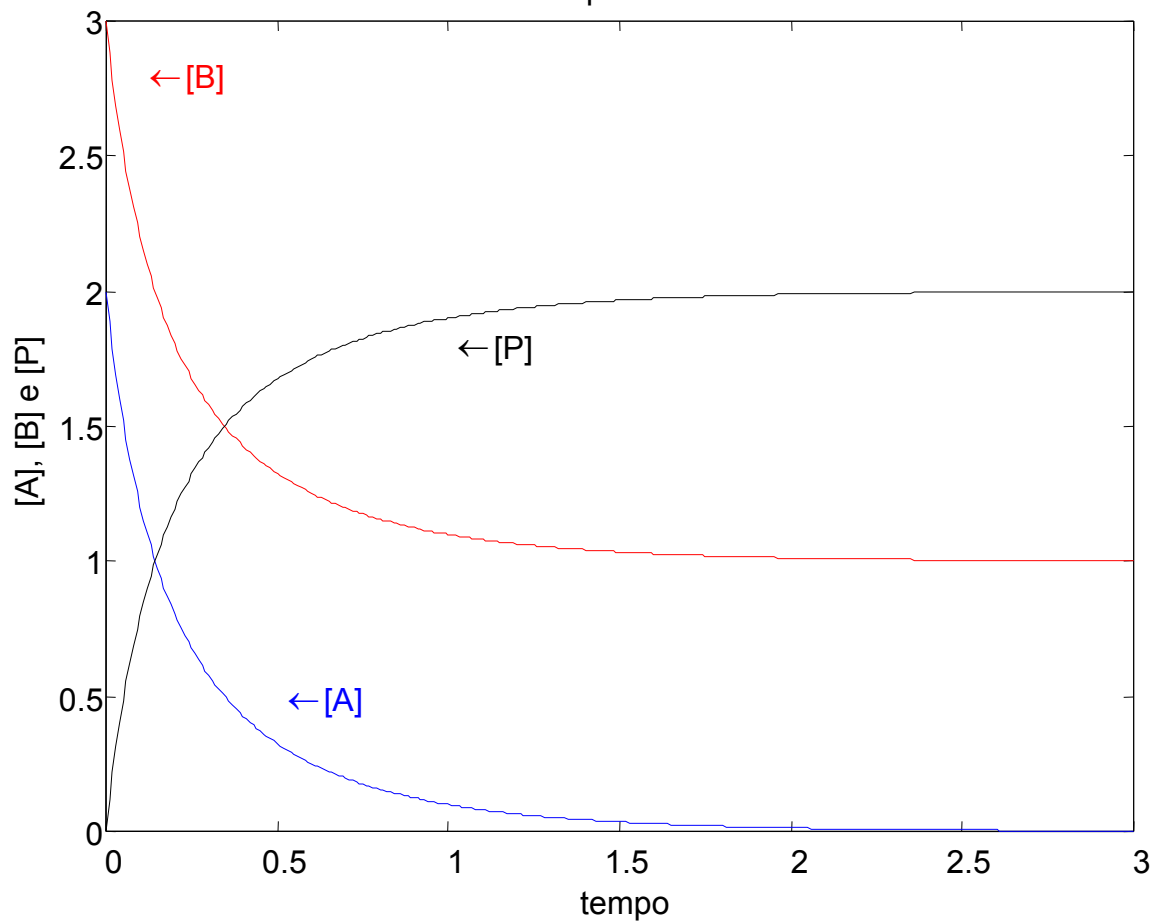
$$[A] = \frac{[A]_0 \exp(-\Delta_{BA} kt)}{[B]_0 - [A]_0 \exp(-\Delta_{BA} kt)} ([B]_0 - [A]_0)$$

S i noti come l'equazione precedente non possa essere usata nel caso $[B]_0 = [A]_0$

Reazione: $A+B \rightarrow P$ reagente limitante



Grafico c-t del processo $A + B \rightarrow P$

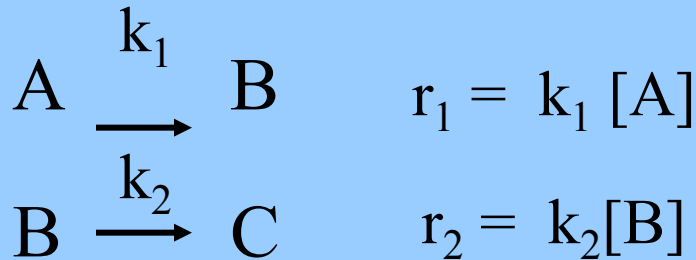


$[A]_0 = 2.0$
 $[B]_0 = 3.0$
 $k = 2.0$

Reazioni consecutive: $A \rightarrow B \rightarrow C$



Reazioni Consecutive



Sistema ODE:

$$\begin{aligned} \frac{d[A]}{dt} &= -k_1 [A] \\ \frac{d[B]}{dt} &= +k_1 [A] - k_2 [B] \\ \frac{d[C]}{dt} &= +k_2 [B] \end{aligned}$$

Leggi di conservazione: $[A]_0 + [C]_0 = [A] + [B] + [C]$

Nella legge di conservazione non è stata inserita la specie B perché si è assunto essere un intermedio instabile

Reazioni consecutive: $A \rightarrow B \rightarrow C$



La prima equazione differenziale può essere facilmente integrata per dare l'espressione di $[A]$ in funzione del tempo:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k_1[A]$$

$$[A] = [A]_0 \exp(-k_1 t)$$

L'espressione di $[A]$ può essere quindi sostituita nell'equazione differenziale di $[B]$ in modo da ottenere un'equazione della sola variabile $[B]$:

$$\frac{d[B]}{dt} + k_2[B] = +k_1[A]_0 \exp(-k_1 t)$$

che diventa una equazione differenziale disomogenea

Reazioni consecutive: $A \rightarrow B \rightarrow C$



Una soluzione della equazione differenziale precedente può essere cercata come la somma:

$$[B] = B_1(t) + B_2(t)$$

con $B_1(t)$ integrale generale dell'equazione omogenea associata:

$$\frac{d[B]}{dt} + k_2[B] = 0$$

e $B_2(t)$ integrale particolare dell'equazione disomogenea

$$\frac{d[B]}{dt} + k_2[B] = + k_1[A]_0 \exp(-k_1 t)$$

Reazioni consecutive: $A \rightarrow B \rightarrow C$



Soluzione equazione differenziale Omogenea

L'equazione omogenea può essere facilmente integrata:

$$\frac{d[B]}{dt} + k_2[B] = 0$$

$B_1(t)$ è l'integrale generale cercato

$$B_1(t) = B_1 \exp(-k_2 t)$$

Reazioni consecutive: $A \rightarrow B \rightarrow C$



Integrale Particolare equazione differenziale Disomogenea

Supponiamo che $B_2(t)$ abbia la forma:

$$B_2(t) = B_2 \exp(-k_1 t)$$

Sostituiamolo quindi nell'equazione differenziale disomogenea per determinare la costante B_2 :

$$\frac{d}{dt} B_2(t) + k_2 B_2(t) = + k_1 [A]_0 \exp(-k_1 t)$$

Reazioni consecutive: $A \rightarrow B \rightarrow C$



Essendo:
$$\frac{d}{dt} B_2(t) = -k_1 B_2 \exp(-k_1 t)$$

l'equazione differenziale disomogenea diventa:

$$-k_1 B_2 \exp(-k_1 t) + k_2 B_2 \exp(-k_1 t) = +k_1 [A]_0 \exp(-k_1 t)$$

ed affinché l'uguaglianza resti verificata:

$$-k_1 B_2 + k_2 B_2 = +k_1 [A]_0 \quad \Rightarrow \quad B_2 = \frac{+k_1 [A]_0}{k_2 - k_1}$$

Reazioni consecutive: $A \rightarrow B \rightarrow C$



Abbiamo quindi trovato un integrale particolare dell'equazione differenziale disomogenea:

$$B_2(t) = \left(\frac{k_1 [A]_0}{k_2 - k_1} \right) \exp(-k_1 t)$$

Per cui l'integrale generale dell'equazione differenziale disomogenea risulterà:

$$[B] = B_1(t) + B_2(t) = B_1 \exp(-k_2 t) + \left(\frac{k_1 [A]_0}{k_2 - k_1} \right) \exp(-k_1 t)$$

Reazioni consecutive: $A \rightarrow B \rightarrow C$



La costante B_1 verrà determinata dalle condizioni iniziali, ad esempio nel caso in cui $[B]_0 = 0$ allora:

$$[B]_0 = 0 = B_1 + \left(\frac{k_1 [A]_0}{k_2 - k_1} \right) \quad \Rightarrow \quad B_1 = - \left(\frac{k_1 [A]_0}{k_2 - k_1} \right)$$

L'integrale generale può essere riscritto:

$$[B] = \left(\frac{k_1 [A]_0}{k_2 - k_1} \right) [\exp(-k_1 t) - \exp(-k_2 t)]$$

Reazioni consecutive: $A \rightarrow B \rightarrow C$



$$[B] = \left(\frac{k_1 [A]_0}{k_2 - k_1} \right) [\exp(-k_1 t) - \exp(-k_2 t)]$$

Si noti come la concentrazione di B risulti sempre $[B] > 0$ anche se $k_2 < k_1$, ossia se il fattore che moltiplica i due esponenziali è negativo, infatti risulta:

$$k_2 < k_1 \Rightarrow [\exp(-k_1 t) < \exp(-k_2 t)] \Rightarrow [\exp(-k_1 t) - \exp(-k_2 t)] < 0$$

Reazioni consecutive: $A \rightarrow B \rightarrow C$



Nel caso più generale in cui $[B]_0 \neq 0$ allora:

$$[B]_0 = B_1 + \left(\frac{k_1 [A]_0}{k_2 - k_1} \right) \quad \Rightarrow \quad B_1 = [B]_0 - \left(\frac{k_1 [A]_0}{k_2 - k_1} \right)$$

e l'integrale generale va riscritto:

$$[B] = [B]_0 \exp(-k_2 t) + \left(\frac{k_1 [A]_0}{k_2 - k_1} \right) [\exp(-k_1 t) - \exp(-k_2 t)]$$

Reazioni consecutive: $A \rightarrow B \rightarrow C$



Si noti come, in entrambi i casi, l'espressione della concentrazione di B in funzione del tempo presenti uno 0 al denominatore se $k_2=k_1$. In questo caso l'espressione per il calcolo della [B] si ottiene calcolando il limite:

$$l = \lim_{k_2 \rightarrow k_1} \left(\frac{k_1 [A]_0}{k_2 - k_1} \right) [\exp(-k_1 t) - \exp(-k_2 t)]$$

e sostituendolo nelle espressioni precedenti.

Reazioni consecutive: $A \rightarrow B \rightarrow C$



Introducendo la variabile $\Delta k = k_2 - k_1$ il limite può essere anche riscritto come :

$$l = k_1 [A]_0 \exp(-k_2 t) \lim_{\Delta k \rightarrow 0} \left(\frac{\exp(\Delta k t) - 1}{\Delta k} \right)$$

Per il primo teorema di L'Hôpital il limite precedente può allora essere calcolato come:

$$\lim_{\Delta k \rightarrow 0} \left(\frac{\exp(\Delta k t) - 1}{\Delta k} \right) = \lim_{\Delta k \rightarrow 0} \left[\frac{\frac{d}{d\Delta k} (\exp(\Delta k t) - 1)}{\frac{d}{d\Delta k} \Delta k} \right] = \lim_{\Delta k \rightarrow 0} \left[\frac{t \exp(\Delta k t)}{1} \right] = t$$

Reazioni consecutive: $A \rightarrow B \rightarrow C$



Per cui l'espressione del limite cercato diventa:

$$l = k_1 [A]_0 \exp(-k_2 t)t$$

e l'andamento di $[B]$ in funzione del tempo quando $k_2 = k_1$ diventa rispettivamente:

$$[B]_0 = 0 \quad [B] = k_1 [A]_0 \exp(-k_2 t)t$$

$$[B]_0 \neq 0 \quad [B] = ([B]_0 + k_1 [A]_0 t) \exp(-k_2 t)$$

Reazioni consecutive: $A \rightarrow B \rightarrow C$



Nel caso $[B]_0 = 0$, e $k_1 \neq k_2$ la concentrazione $[C]$ può essere ricavata dall'equazione di conservazione:

$$[C] = [A]_0 + [C]_0 - [A] - [B]$$

$$[C] = [C]_0 + [A]_0 \left[1 + \frac{k_2 \exp(-k_1 t) - k_1 \exp(-k_2 t)}{k_1 - k_2} \right]$$

Nel caso $[B]_0 \neq 0$ si lascia al lettore la determinazione dell'espressione esplicita di $[C]$ in funzione del tempo:

Reazioni consecutive: $A \rightarrow B \rightarrow C$



Nel caso $[B]_0 = 0$, e $k_1 = k_2$ la concentrazione $[C]$ diventa:

$$[C] = [A]_0 + [C]_0 - [A] - [B]$$

$$[C] = [C]_0 + [A]_0 \cdot [\exp(-k_1 t) + k_1 \cdot t \cdot \exp(-k_2 t)]$$

Nel caso $[B]_0 \neq 0$ si lascia al lettore la determinazione dell'espressione esplicita di $[C]$ in funzione del tempo:

Reazioni consecutive: $A \rightarrow B \rightarrow C$



$[A]_0 = 2.0$
 $[B]_0 = 0.0$
 $[C]_0 = 0.0$
 $k_1 = 1.0$
 $k_2 = 1.0$

