Matematična fizika 1

5. domača naloga

2023/2024

Snov A razpada v snov B, snov B razpada v snov C in snov C razpada v snov A. Vse reakcije so prvega reda z enakimi konstantami reakcijske hitrosti k. Na začetku imamo v zaprti posodi samo snov A. Predpostavi, da so vse snovi plini in so vedno dobro premešani. Označimo z B_{max} največjo koncentracijo snovi B med potekom reakcije ter z A_{min} najmanjšo koncentracijo snovi A med potekom. Določi $B_{\text{max}}/A_{\text{min}}$.

$$\begin{tikzcd}
A \arrow[rr, "k"] & & B \arrow[dl, "k"] \\
& C \arrow[ul, "k"] &
\end{tikzcd}$$

Kemijski poduk: reakcija $X \to Y$ je n-tega reda, če je hitrost razpadanja čiste snovi X sorazmerna s koncentracijo te snovi na n-to potenco. Sorazmernostnemu faktorju k rečemo konstanta reakcijske hitrosti:

$$\frac{\mathrm{d}[X]}{\mathrm{d}t} = -k[X]^n$$

Z $[X]$ je označena koncentracija snovi X.

Rešitev

Označimo z A, B in C koncentracije snovi in z A_0, B_0, C_0 začente koncentracije, pri čemer velja $B_0 = C_0 = 0$. Zapišemo enačbe reakcijskih hitrosti

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = -kA + kC,$$

$$\frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}t} = -kB + kA,$$

$$\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} = -kC + kB.$$

Sistem enačb lahko zapišemo v matrični obliki

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{bmatrix} A \\ B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -k & 0 & k \\ k & -k & 0 \\ 0 & k & -k \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A \\ B \\ C \end{bmatrix}.$$

Če matriko koeficientov označimo z A in vektor koncentracij z $\mathbf{y}(t)$, imamo $\mathbf{y}' = \mathsf{A}\mathbf{y}$. Označimo še vektor začetnih vrednosti z $\mathbf{y}_0$. Najprej poiščimo lastne vrednosti matrike A. Karakteristični polinom je

$$p_{\mathsf{A}}(\lambda) = k^3 - (k+\lambda)^3,$$

s koreni $\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}(-3 \pm i\sqrt{3})$ in $\lambda_3 = 0$. Lastne vektorje zložimo kot stolpce v matriko P

$$\mathsf{P} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(-1-i\sqrt{3}) & \frac{1}{2}(-1+i\sqrt{3}) & 1 \\ \frac{1}{2}(-1+i\sqrt{3}) & \frac{1}{2}(-1-i\sqrt{3}) & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix},$$

ki ji rečemo prehodna matrika. Velja

$$\mathsf{A} = \mathsf{P}\mathsf{D}\mathsf{P}^{-1},$$

kjer je D diagonalna matrika z lastnimi vrednostmi. Eksponentno funkcijo najlažje izvedemo na diagonalni matriki, saj se eksponencira vsak člen v diagonali posebej. Splošna rešitev sistema enačb z začetnimi pogoji je

$$\mathbf{y}(t) = \mathsf{P}e^{\mathsf{D}t}\mathsf{P}^{-1}\mathbf{y}_0.$$

Sledi nekaj matematične telovadbe z množenjem matrik, vendar nam začetni pogoj zelo olajša delo. V splošnem pa se rešitev glasi

$$\begin{bmatrix} A \\ B \\ C \end{bmatrix} = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 2A_0 - B_0 - C_0 \\ 2B_0 - A_0 - C_0 \\ 2C_0 - A_0 - C_0 \end{bmatrix} e^{-3kt/2}\cos\left(\frac{\sqrt{3}kt}{2}\right) + \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix} C_0 - B_0 \\ A_0 - C_0 \\ B_0 - A_0 \end{bmatrix} e^{-3kt/2}\sin\left(\frac{\sqrt{3}kt}{2}\right) + \frac{A_0+B_0+C_0}{3}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Z danimi začetnimi pogoji dobimo

$$\begin{bmatrix} A \\ B \\ C \end{bmatrix} = \frac{A_0}{3}\left(\begin{bmatrix} 2 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix} e^{-3kt/2}\cos\left(\frac{\sqrt{3}kt}{2}\right) + \sqrt{3}\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix} e^{-3kt/2}\sin\left(\frac{\sqrt{3}kt}{2}\right) + \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}\right).$$

Koncentracija snovi B se s časom spreminja kot

$$B(t) = \frac{A_0}{3}\left(e^{-3kt/2}\left(\sqrt{3}\sin(\sqrt{3}kt/2) - \cos(\sqrt{3}kt/2)\right) + 1\right).$$

Odvod enačimo z nič in dobimo

$$\tan\left(\frac{\sqrt{3}kt}{2}\right) = \sqrt{3}.$$

Iščemo le prvo rešitev

$$t_B = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}k}.$$

Koncentracija snovi B ob času t_B je $B_{\max} = A_0(e^{-\pi/\sqrt{3}}+1)/3$. Koncentracija snovi A se s časom spreminja kot

$$A(t) = \frac{A_0}{3}\left(2e^{-3kt/2}\cos(\sqrt{3}kt/2) + 1\right).$$

Odvod enačimo z nič in dobimo

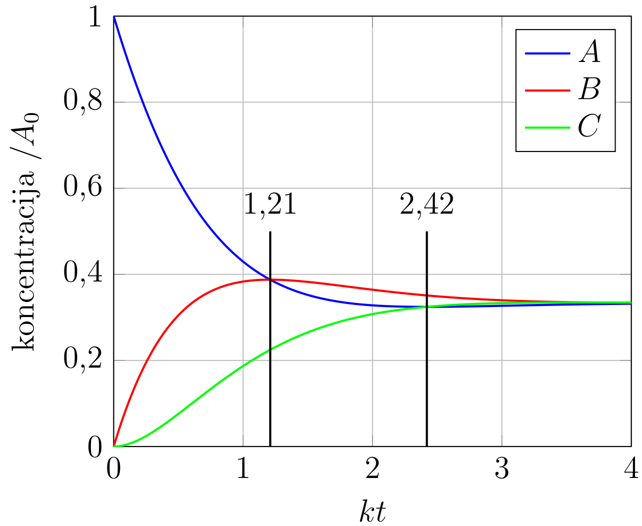
$$\tan\left(\frac{\sqrt{3}kt}{2}\right) = -\sqrt{3}.$$

Iščemo le prvo rešitev

$$t_A = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}k}.$$

Koncentracija snovi A ob času t_A je $A_{\min} = A_0(-e^{-2\pi/\sqrt{3}} + 1)/3$. Razmerje med največjo koncentracijo snovi B in najmanjšo koncentracijo snovi A je

$$\frac{B_{\max}}{A_{\min}} = \frac{1 + e^{\pi/\sqrt{3}}}{2\sinh(\pi/\sqrt{3})} = 1{,}195.$$



1
0,8
0,6
0,4
0,2
0
0
1
2
3
4
kt
koncentracija /A_0
1,21
2,42
A
B
C