

МАКСИМАЛЬНАЯ СКОРОСТЬ АВТОКАТАЛИТИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ

Автокаталитическая реакция – это реакция, на которую какой-либо из её продуктов оказывает каталитическое влияние. Уравнение автокаталитической реакции можно представить в виде:



Пусть a – концентрация вещества A , b – концентрация вещества B . Тогда согласно закону действующих масс скорость реакция пропорциональна действующим массам в момент времени t :

$$\vartheta = -\frac{da}{dt} = \frac{db}{dt} = kab.$$

Пусть начальные концентрации веществ A и B равны a_0 и b_0 соответственно. По ходу реакции к моменту времени t израсходовано $(a_0 - a)$ (моль/литр) вещества A , образовалось $(b - b_0)$ (моль/литр) вещества B . Так как число прореагировавших концентраций обоих веществ одинаково, то $a_0 - a = b - b_0$. Выразив отсюда a , получим: $a = a_0 + b_0 - b$. Подставим полученное выражение в формулу скорости

$$\begin{aligned}\vartheta &= \frac{db}{dt} = kb(a_0 + b_0 - b) \\ \vartheta' &= \frac{d\vartheta}{db} = k(a_0 + b_0 - 2b) = 0\end{aligned}$$

Отсюда находим стационарную точку $b = \frac{a_0 + b_0}{2}$. Так как $\vartheta'' = -2k < 0$, то $b = \frac{a_0 + b_0}{2}$ – точка локального максимума.

Зависимость концентрации катализатора от времени описывается дифференциальным уравнением:

$$\frac{db}{dt} = kb(a_0 + b_0 - b), \quad b(0) = b_0$$

Интегрирование методом разложения на простейшие дроби даёт выражение:

$$b(t) = (a_0 + b_0) \frac{b_0 e^{k(a_0 + b_0)t}}{a_0 + b_0 e^{k(a_0 + b_0)t}}$$

Таким образом, максимальная скорость автокаталитической реакции достигается при половине начальных концентраций.