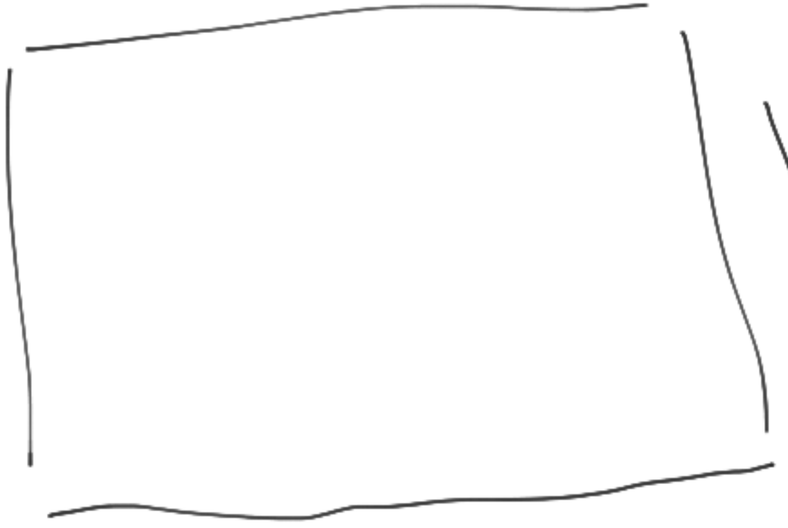
Dinámica de las concentraciones de 2 especies que reaccionan entre sí

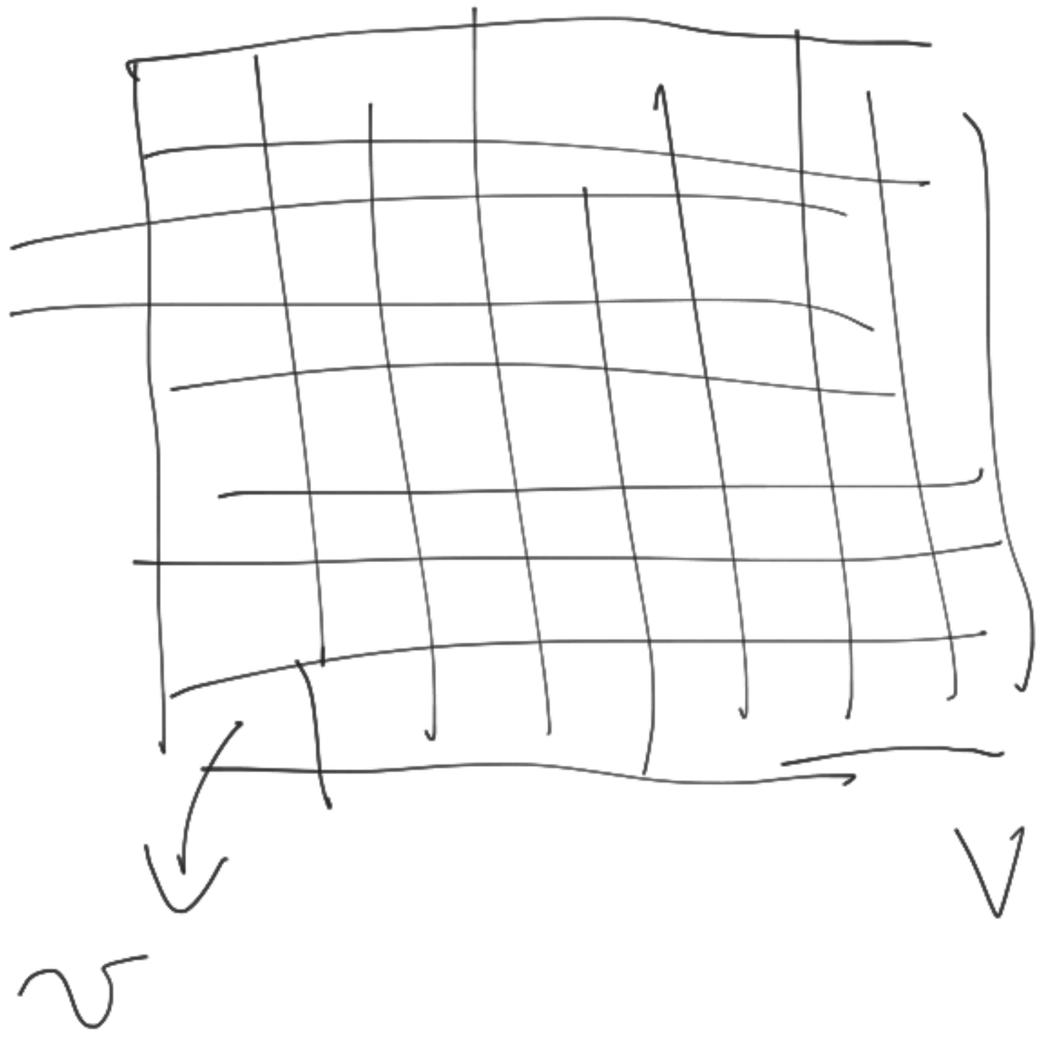
$$A + B \longrightarrow C$$



V = volumen donde ocurre la reacción

Para que A y B se puedan unir y formar C tienen que estar dentro de 1 cierta distancia

v = volumen tal que si 1 molécula de A y una de B están ahí dentro se "ven" tienen prob no nula de reaccionar.

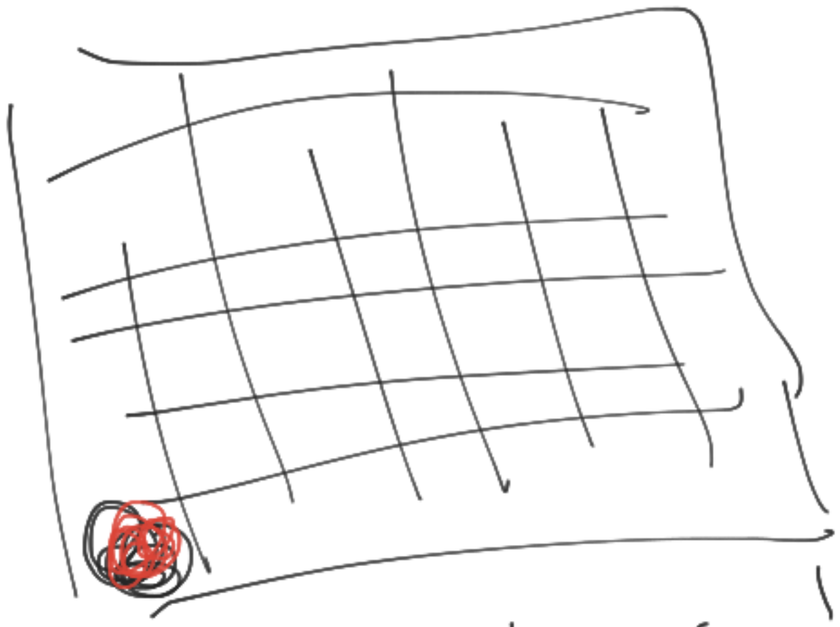


En V tengo $\frac{V}{\overline{V}}$

volúmenes chiquitos

Supongamos que tengo N_A moléculas de A en V y N_B de B

Prob de que 1 molécula de A
caiga en 1 dado volumen v
en $\frac{v}{V}$



$\frac{v}{V} \ll 1$

$N_A \frac{v}{V} < 1$ prob de tener molécula de A en v

$N_B \frac{v}{V}$ → prob de 1 molécula de B en v

$\langle N_{Av} \rangle$ = número medio de moléculas de A en el volumen v = 0 · Prob tener + 1 prob de tener 1 en v + 2 prob tener 2 + ... =

$\langle N_{Av} \rangle$ = prob de tener 1 molécula de A en v

prob de encontrar en ν cada

1 molécula de A y 1 de B

$$\frac{N_A \nu}{V} \cdot \frac{N_B \nu}{V}$$

¿cuántos encuentros ocurren

en V?

$$\{N_{encuentros}\} = 1\,P_{\sim} + 1\,P_{\sim} +$$

$$\ldots\ldots = \frac{V}{\nu}\; N_A \frac{\nu}{V}\; N_B \frac{\nu}{V}$$

$$N_A(t+\Delta t) - N_A(t) =$$

$$= -\,\text{número de reacciones que ocurren en } \Delta t \quad A+B \to C$$

Prob de que ocurra la reacción durante Δt dado que 1 molécula de A y 1 de B se encuentren en un ν

$= \alpha \Delta t$

Nombre de reacciones que ocurren entre t y Δt en V

$$= N_A \frac{\nu}{V} \; N_B \frac{\nu}{V} \; \frac{V}{\nu} \; \alpha \; \Delta t$$

$$N_A(t+\Delta t) - N_A(t) = - N_A \frac{\nu}{V} N_B \frac{\nu}{V} \frac{V}{\nu} \alpha \Delta t$$

$$[A](t) = \frac{N_A(t)}{V}$$

$$\frac{\Delta [A]}{\Delta t} = - [A][B] \alpha \nu$$

$$\frac{d[A]}{dt} = -\alpha v [A][B]$$

$\alpha \Delta t =$ prob $\rightarrow [\alpha \Delta t] =$ no hay unidades

$[\alpha] = \frac{1}{[\text{tiempo}]}$ $[\alpha v] = \frac{[v_0]}{[\text{tiempo}]} =$

$= \frac{1}{[\text{tiempo}][\text{concentración}]}$

$$A + B \xrightarrow{k} C$$

$$\alpha r = k$$

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

$$A + B \underset{k_1}{\overset{k}{\rightleftharpoons}} C$$

$$C \xrightarrow{k'} A + B$$

$$N_C(t+\Delta t) - N_C(t) = -\alpha' N_C(t) \Delta t$$

1 molécula decide fragmentarse en A y B durante Δt con prob $\alpha' \Delta t$

Número de moléculas de C que decaen en A y B separadas en $N_C \alpha' \Delta t$

$$\frac{\Delta N_C}{\Delta t} = -\alpha' N_C \qquad \frac{\Delta N_C/V}{\Delta t} = -\alpha' \frac{N_C}{V}$$

$$\frac{\Delta [C]}{\Delta t} = \frac{d[C]}{dt} = -\alpha'[C]$$

$\alpha' \rightarrow k'$

$$\frac{\Delta N_A}{\Delta t} = \alpha' N_C$$

$$\Delta N_A = \alpha' N_C \Delta t$$

$$A + B \underset{k'}{\overset{k}{\rightleftharpoons}} C$$

$$\frac{d[A]}{dt} = \frac{d[B]}{dt} = -k[A][B] + k'[C]$$

$$\frac{\Delta N_A}{\Delta t} = -\frac{\alpha v}{V} N_A N_B \quad , \quad \Delta N_A = -\frac{\alpha v}{V} N_A N_B \Delta t$$

$$\Delta N_C = \frac{\alpha v}{V} N_A N_B \Delta t$$

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

Análisis de acción de masas

Ley de acción de masas

$$\frac{d}{dt} = 0 \rightarrow k[A][B] = k'[C]$$

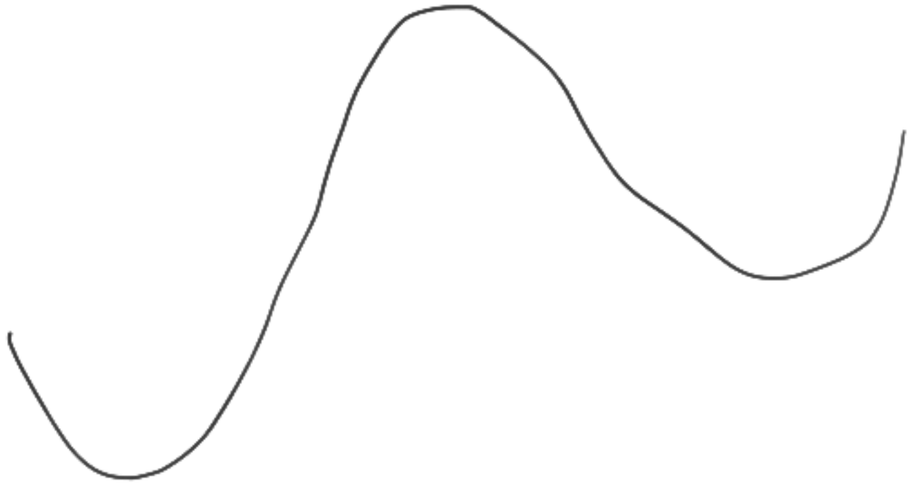
$$\frac{[A][B]}{[C]} = \frac{k'}{k}$$ función de T

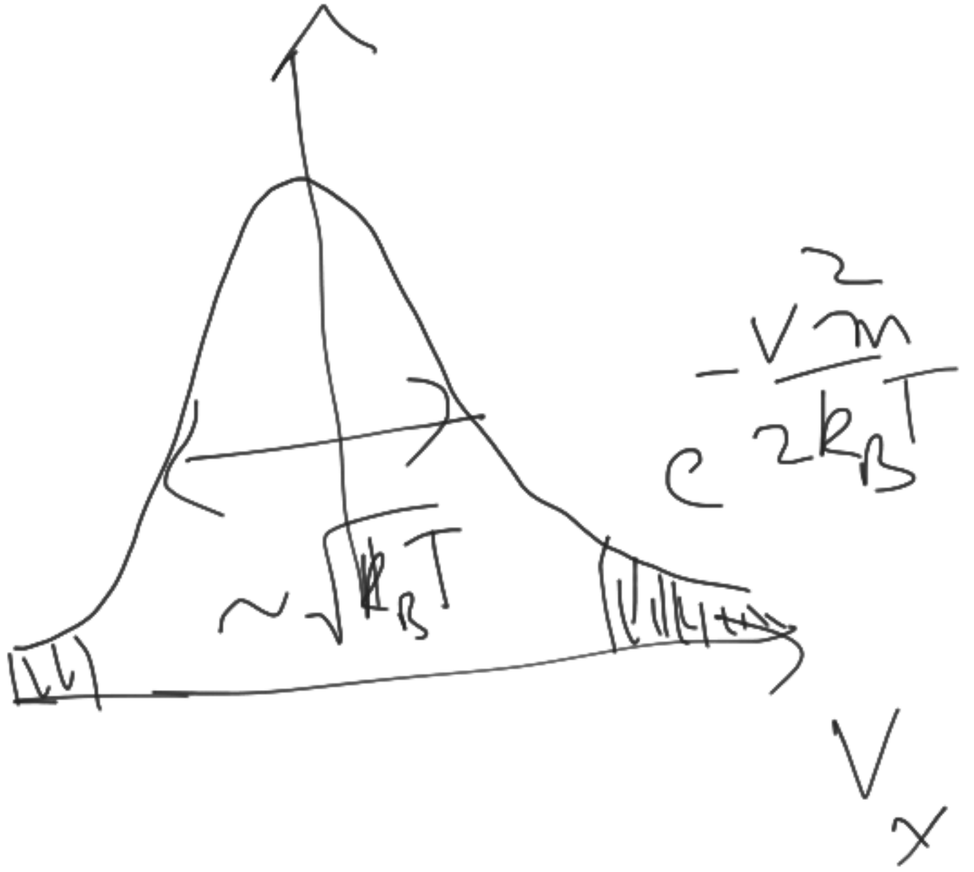
$$A + B + E \overset{K}{\rightleftharpoons} C$$

$$\Delta N_A = - \left(\frac{N_A}{V}\right)\left(\frac{N_B}{V}\right)\left(\frac{N_E}{V}\right) \sim \alpha \, \Delta t \cdot \frac{V}{V}$$

$$\frac{d[A]}{dt} = -K[A][B][C]$$

$$[K] = \frac{[Vol]^2}{[tempo]} = \frac{1}{[tempo][conc]^2}$$




$e^{-\frac{v^2 m}{2k_B T}}$
$\sim \sqrt{k_B T}$
v_x

$$A + 2B \underset{k'}{\overset{k}{\rightleftharpoons}} C$$

$$\Delta N_A = -\alpha \Delta t \, N_A \frac{\nu}{V} \, B \frac{\nu}{V} \, B \frac{\nu}{V} \frac{V}{\nu}$$

$$+ k' N_C \Delta t$$

$$\Delta N_B = -2\alpha \Delta t \, N_A \frac{\nu}{V} \left(B \frac{\nu}{V}\right)^2 \frac{V}{\nu}$$

$$+ 2k' N_C \Delta t$$

$$\frac{d[B]}{dt} = -2k[A][B]^2 + 2k'[C]$$

$$A + 2B \underset{k'}{\overset{k}{\rightleftharpoons}} C + B$$

$$\Delta N_B = -\alpha N_A \frac{r}{V} \left(N_B \frac{r}{V}\right)^2 \frac{V}{r} \Delta t$$