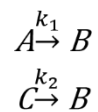


Složena hemijska reakcija

Kada se u hemijskoj reakciji dobija samo jedan aktivni kompleks, odnosno kada se hemijska reakcija odigrava u jednom stupnju, onda se ona naziva **elementarna hemijska reakcija**. Međutim, ako u nekoj hemijskoj reakciji nastaju dva ili više aktivirana kompleksa, takva hemijska reakcija se naziva **složena hemijska reakcija**.

Kompetitivne reakcije prvog reda

Kompetitivne reakcije predstavljaju poseban slučaj paralelnih reakcija u kojima iz dva ili više reaktanata nastaje isti produkt. Osnovni primer mehanizma jedne kompetitivne reakcije prvog reda je:



Brzine trošenja reaktanata A i C u ovom primeru prate jednostavnu kinetiku reakcije prvog reda, pa su integralni izrazi dati sledećim poznatim jednačinama:

$$-\frac{dA}{dt} = k_1A + k_2A$$

$$-\frac{dA}{A} = -k_1 dt$$

$$\int_{A_0}^A \frac{dA}{A} = \int_0^t -k_1 dt$$

$$\ln \frac{A}{A_0} = -k_1 t$$

$$A = A_0 e^{-k_1 t}$$

Gde je analogna zavisnost koncentracije C od vremena data kao:

$$-\frac{dC}{dt} = k_2 C$$

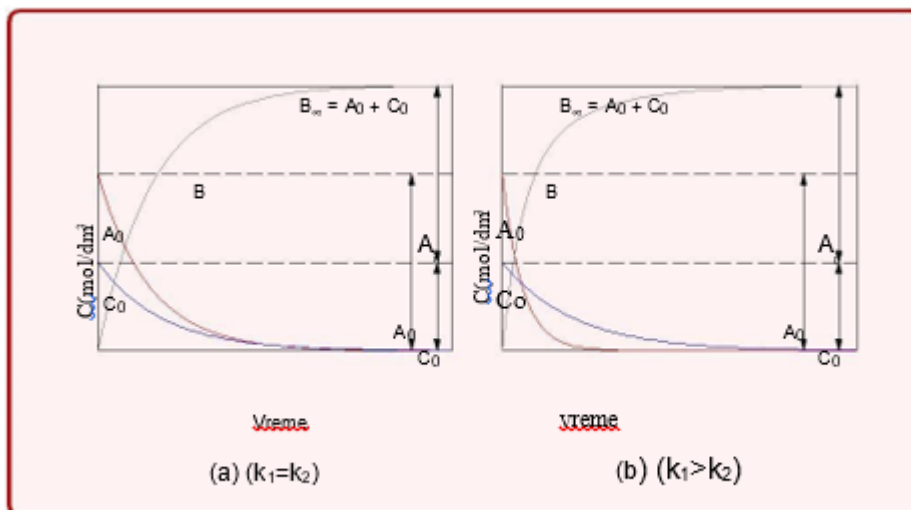
$$C = C_0 e^{-k_2 t}$$

$$\frac{dB}{dt} = k_1 A = k_1 A + k_2 C$$

$$\frac{dB}{dt} = k_1 A_0 e^{-k_1 t} + k_2 C_0 e^{-k_2 t}$$

$$\int_0^B dB = \int_0^t (k_1 A_0 e^{-k_1 t} + k_2 C_0 e^{-k_2 t}) dt$$

$$B = A_0 (1 - e^{-k_1 t}) + C_0 (1 - e^{-k_2 t})$$



Na slici je prikazana zavisnost koncentracije učesnika kompetitivne reakcije od vremena u slučaju kada su konstante brzine reaktanata značajno različite ali i kada su istog reda veličine.

Upustvo za korišćenje programa

Program je napisan u Matlab-u R2015a i omogućava nam da na osnovu početnih koncentracija reaktanata, dobijemo koncentraciju produkta, nakon određenog vremena.

Na početku je potrebno pokrenuti m-file pod nazivom: Kompetitivne reakcije prvog reda

Kada je program pokrenut, potrebno je uneti promenljive veličine, za oba reaktanta koja se koriste, kao i vreme trajanja reakcije. Takođe, potrebno je voditi računa i o jedinicama jer su one definisane programom.

Jedinice:

Koncentracije koje se unose su u: mol/dm^3

Konstante brzine su u: s^{-1}

Vreme u: s

Nakon unosa svih potrebnih veličina, kliknemo na dugme "Grafički prikaz" kako bi dobili zavisnost koncentracije naših reaktanata od vremena trajanja reakcije. Potom, kliknemo na dugme "Prikaz rezultata" kako bi dobili krajnje koncentracije naših reaktanata nakon izvršene reakcije kao i koncentraciju produkta nastalog nakon reakcije.

Rešeni primer:

Unesite početnu koncentraciju prvog reaktanta A u mol/dm^3 : 4

Unesite početnu koncentraciju drugog reaktanta C u mol/dm^3 : 2

Konstanta brzine prve reakcije u s^{-1} : 1

Konstanta brzine druge reakcije u s^{-1} : 6

Vreme trajanja reakcije je u s: $t = 7$

Izračunata koncentracija prvog reaktanta A u mol/dm^3 posle vremena t iznosi: 0.004

Izračunata koncentracija drugog reaktanta C u mol/dm^3 posle vremena t iznosi: 0.000

Izračunata koncentracija produkta B u mol/dm^3 posle vremena t iznosi: 5.996

