En reacciones químicas sucesivas, $A \rightarrow B \rightarrow C$, la velocidad de cada reacción es proporcional a la cantidad restante de cada concentración. Determínese la concentración x de A e y de C en función del tiempo, sabiendo que a, b y 0 son las concentraciones iniciales de A, B y C respectivamente.

- Sabemos que la velocidad de cada reacción es proporcional a la cantidad restante de concentración. Así, para la reacción $A \longrightarrow B$, llamando $x(t)$ a la cantidad de sustancia A en el instante t:

(1) $\dfrac{dx}{dt} = -K_1 x(t)$ (ponemos el signo menos para indicar que esa velocidad es negativa ya que $x(t)$ decrece: la velocidad es de desaparición de A, no de creación)

Para la reacción $B \longrightarrow C$ y llamando $z(t)$ a la cantidad de B en el instante t, tenemos:

(2) $\dfrac{dz}{dt} = -K_2 z(t)$, ~~donde~~

Por último, la velocidad de desaparición de B es igual a la de aparición de C, con lo cual $-\dfrac{dz}{dt} = \dfrac{dy}{dt} \rightarrow \dfrac{dy}{dt} = K_2 z(t)$. Como nos interesa obtener $y(t)$, vamos a transformar la expresión (2) para que sólo aparezca esta función:

$z(t)$ es la cantidad de sustancia B en el instante t. Esta cantidad se obtiene sumando a la cantidad inicial de B, que es b, lo que le llega a partir de la reacción $A \longrightarrow B$, y luego restando lo que desaparece en la reacción $B \to C$.

- Como $x(t)$ es la cantidad de A en el instante t y a era la cantidad inicial → $a - x(t)$ es la cantidad de A que se ha convertido en B (la que había inicialmente menos la que queda)
- Como $y(t)$ es la cantidad de C en el instante t y 0 era la cantidad inicial de C, $y(t)$ aparece como consecuencia de la reacción $B \to C$, y es sustancia B que ha reaccionado (y por tanto desaparecido). Luego:

$z(t) = b + (a - x(t)) - y(t)$. La expresión (2) queda:

(3). $\frac{dy}{dt} = K_2(b + a - x(t) - y(t))$

Como teníamos (1): $\frac{dx}{dt} = -K_1 x(t) \to \frac{dx}{x(t)} = -K_1 dt \to$

$\to \ln(x(t)) = -K_1 t + C_1 \to x(t) = A e^{-K_1 t}$. Como $x(0) = a \to$

$\to x(0) = A e^0 = a \to A = a$. Tenemos $x(t) = a e^{-K_1 t}$. Sustituyendo en (3):

$$\frac{dy}{dt} = K_2\left(b+a-ae^{-K_1 t}-y(t)\right) \rightarrow \underbrace{\frac{dy}{dt} = -K_2\, y(t) \quad + K_2\left(b+a-ae^{-K_1 t}\right)}_{\text{E.D. lineal no homogénea de orden 1.}}$$

* Resolvemos la homogénea asociada:

$$\frac{dy}{dt} = -K_2\, y(t) \rightarrow \frac{dy}{y(t)} = -K_2\, dt \rightarrow \ln(y(t)) = -K_2 t + C_1$$

$$\rightarrow y(t) = e^{-K_2 t + C_1} = B e^{-K_2 t} \rightarrow y(t) = B\, e^{-K_2 t}$$ es solución general de la homogénea.

Para resolver la no homogénea usamos el método de variación de constantes:

Solución general de la No homogénea = sol. gral. homog + $y_p(t)$

con $y_p(t) = B(t)\, e^{-K_2 t}$ es una solución particular de la E.D. no homogénea, y $B(t)$ cumple:

$$B'(t) e^{-K_2 t} = K_2\left(b+a-ae^{-K_1 t}\right) \rightarrow B'(t) = K_2(b+a)e^{K_2 t} - K_2 a e^{(K_2-K_1)t}$$

Integrando:

(a) $B(t) = (b+a)e^{K_2 t} - \frac{K_2}{K_2-K_1} a\, e^{(K_2-K_1)t}$, si $K_2 \neq K_1$

(b) $B(t) = (b+a)e^{K_2 t} - K_2 a t$, si $K_2 = K_1$

Así, la solución general es:

(a) $y(t) = Be^{-K_2 t} + b + a - \frac{K_2}{K_2 - K_1} a e^{-K_1 t}$. Como $y(0) = 0$

$\rightarrow B + b + a - \frac{K_2}{K_2 - K_1} a = 0 \rightarrow B = -(b+a) + \frac{K_2}{K_2 - K_1} a$. Por tanto:

$y(t) = \left(-(b+a) + \frac{K_2}{K_2 - K_1} a\right) e^{-K_2 t} + b + a - \frac{K_2}{K_2 - K_1} a e^{-K_1 t}$. Simplificando:

$$\boxed{y(t) = (a+b)\left(1 - e^{-K_2 t}\right) + \frac{K_2}{K_2 - K_1} a \left(e^{-K_2 t} - e^{-K_1 t}\right)}$$

(b) $y(t) = B e^{-K_2 t} + a + b - K_2 a t e^{-K_2 t}$. Como $y(0) = 0 \rightarrow$

$\rightarrow B + a + b = 0 \rightarrow B = -a - b$. Luego:

$y(t) = -(a+b) e^{-K_2 t} + a + b - K_2 a t e^{-K_2 t}$. Simplificando:

$$\boxed{y(t) = (a+b)\left(1 - e^{-K_2 t}\right) - K_2 a t e^{-K_2 t}}$$

En reacciones químicas sucesivas, $X \to Y \to Z$, la velocidad de cada reacción es proporcional a la cantidad restante de cada concentración. Determínese la concentración y de Y en función del tiempo sabiendo que al principio las concentraciones son de 20 para X y cero para Y y Z

A diferencia que en el problema anterior ahora nos piden la concentración de Y en el tiempo, pero eso no cambia el planteamiento:

- Estudiamos primero la reacción $X \longrightarrow Y$.

Como la velocidad es proporcional a la cantidad de X (que llamamos $x(t)$):

$$\frac{dx}{dt} = -K_1 x(t)$$

(siempre en negativo pues es una velocidad negativa: decelera)

Resolvemos: $\frac{dx}{x(t)} = -K_1 dt \rightarrow \ln(x(t)) = -K_1 t + C_1 \rightarrow$

$\rightarrow x(t) = Ae^{-K_1 t}$. Imponemos la condición inicial:

$x(0) = 20 \rightarrow Ae^{0} = 20 \rightarrow A = 20$. Por tanto,

$$\underline{x(t) = 20e^{-K_1 t}}$$

• Para la reacción $Y \longrightarrow Z$, llamando $y(t)$ a la concentración de Y en el tiempo,

(2) $\frac{dy}{dt} = -K_2\, y(t)$. Vamos a transformarla, como en el ejercicio anterior, utilizando lo que sabemos sobre la cantidad de Y en el tiempo, y sabiendo que la velocidad con que desaparece Y es la misma que la velocidad de aparición de Z. Esto es: $\frac{dy}{dt} = -\frac{dz}{dt}$, siendo $z(t)$ la cantidad de Z en el instante t.

Además, $y(t)$ es igual a la cantidad de sustancia X que se transforma en Y menos la de sustancia Y que se transforma en Z.

Es decir: $y(t) = \underbrace{20 - x(t)}_{\substack{\text{sustancia } X \\ \text{transformada en } Y\text{:} \\ \text{la que había al prin-} \\ \text{cipio menos la que queda}}} \; - \underbrace{z(t)}_{\substack{\text{sustancia } Z \text{ (que proviene de la } Y\text{,} \\ \text{transformada)}}}$

Sustituyendo esto en la expresión (2) tenemos:

$\frac{dz}{dt} = K_2\left(20 - x(t) - z(t)\right)$. Como además tenemos $x(t) = 20e^{-K_1 t}$:

$$\frac{dz}{dt} = K_2\left(20 - 20e^{-K_1 t} - z(t)\right) \rightarrow \underbrace{\frac{dz}{dt} + K_2 z(t) = 20K_2 - 20K_2 e^{-K_1 t}}_{\text{E.D. lineal no homogénea de orden 1.}}$$

* Resolvemos la homogénea: $\frac{dz}{dt} = -K_2 z(t) \rightarrow$

$$\rightarrow \frac{dz}{z(t)} = -K_2\, dt \rightarrow \ln(z(t)) = -K_2 t + C \rightarrow$$

$$z_H(t) = Be^{-K_2 t} \rightarrow \text{sol. general de la homogénea.}$$

* Para resolver la no homogénea tenemos:

$z(t) = z_H(t) + z_p(t)$ donde $z_p(t)$ es una solución particular de la no homogénea que obtenemos por el método de variación de constantes:

$$z_p(t) = B(t)e^{-K_2 t}, \text{ con } B'(t)e^{-K_2 t} = 20K_2 - 20K_2 e^{-K_1 t}$$

$$B'(t) = 20K_2 e^{K_2 t} - 20K_2 e^{(K_2 - K_1)t} \longrightarrow \text{(Integramos)}$$

(a) $B(t) = 20e^{K_2 t} - 20\frac{K_2}{K_2 - K_1} e^{(K_2 - K_1)t}$, si $K_1 \neq K_2$

(b) $B(t) = 20e^{K_2 t} - 20K_2 t$

Así, la solución general de la E.D. completa es:

(a) $z(t) = B e^{-k_2 t} + 20 - \frac{20 k_2}{k_2 - k_1} e^{-k_1 t}$. Como $z(0) = 0$

$$\rightarrow B + 20 - \frac{20k_2}{k_2 - k_1} = 0 \rightarrow B = \frac{20k_2}{k_2 - k_1} - 20$$

Así, $z(t) = \left(\frac{20k_2}{k_2 - k_1} - 20\right) e^{-k_2 t} + 20 - \frac{20k_2}{k_2 - k_1} e^{-k_1 t} \rightarrow$

$$\rightarrow z(t) = 20\left(1 - e^{-k_2 t}\right) + \frac{20k_2}{k_2 - k_1}\left(e^{-k_2 t} - e^{-k_1 t}\right)$$

Como nos interesa $y(t) = 20 - x(t) - z(t) \rightarrow$

$$\rightarrow y(t) = \cancel{20} - 20 e^{-k_1 t} - 20(\cancel{1} - e^{-k_2 t}) - \frac{20k_2}{k_2 - k_1}\left(e^{-k_2 t} - e^{-k_1 t}\right)$$

$$y(t) = -20\left(e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}\right) + 20 \frac{k_2}{k_2 - k_1}\left(e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}\right)$$

$$\rightarrow \underline{y(t) = 20\left(\frac{k_2}{k_2 - k_1} - 1\right)\left(e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}\right)} = 20\left(\frac{k_1}{k_2 - k_1}\right)\left(e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}\right)$$

(b) $z(t) = B e^{-k_2 t} + 20 - 20k_2 t e^{-k_2 t}$. Imponiendo C.I.: $z(0) = 0$

$$\rightarrow B + 20 = 0 \rightarrow B = -20 \rightarrow z(t) = 20\left(1 - e^{-k_2 t}\right) - 20k_2 t e^{-k_2 t}$$

Como $y(t) = 20 - x(t) - z(t) \xrightarrow[(k_1 = k_2)]{}$

$$\rightarrow \underline{y(t) = 20 - \cancel{20 e^{-k_2 t}} - \cancel{20} + \cancel{20 e^{-k_2 t}} + 20k_2 t e^{-k_2 t} = 20k_2 t e^{-k_2 t}}$$