逐次反応の微分方程式とその解

逐次反応

$$\mathbf{A} \xrightarrow{k_1} \mathbf{B} \xrightarrow{k_2} \mathbf{C}$$

解くべき微分方程式は、

$$\frac{d[\mathrm{A}]}{dt} = -k_1[\mathrm{A}], \quad \frac{d[\mathrm{B}]}{dt} = k_1[\mathrm{A}] - k_2[B], \quad \frac{d[\mathrm{C}]}{dt} = k_2[\mathrm{B}]$$

である。

最初の式から

$$[\mathrm{A}]=[\mathrm{A}]_0\exp(-k_1 t)$$

が得られる。

また、2 つの時定数を持ち t=0 で[B]=0 となる解は[B]= $c_1\{\exp(-k_1 t)-\exp(-k_2 t)\}$の形をしていると考えられる。これらを第 2 の式に代入すると、

$$c_1\frac{d\{\exp(-k_1 t)-\exp(-k_2 t)\}}{dt} = k_1[\mathrm{A}]_0\exp(-k_1 t) - c_1 k_2\{\exp(-k_1 t)-\exp(-k_2 t)\}$$

左辺を微分すると、

$$-c_1 k_1\exp(-k_1 t) + c_1 k_2\exp(-k_2 t) = \{k_1[\mathrm{A}]_0 - c_1 k_2\}\exp(-k_1 t) + c_1 k_2\exp(-k_2 t)$$

両辺が等しいためには　$-c_1 k_1 = \{k_1[\mathrm{A}]_0 - c_1 k_2\}$　すなわち c_1=k_1[A]$_0$/(k_2-k_1)でなければならない。すなわち、

$$[\mathrm{B}] = \frac{k_1[\mathrm{A}]_0}{k_2-k_1}\{\exp(-k_1 t)-\exp(-k_2 t)\}$$

こうして得た[B]を第 3 の式に代入すると、

$$\frac{d[\mathrm{C}]}{dt} = \frac{k_1 k_2[\mathrm{A}]_0}{k_2-k_1}\{\exp(-k_1 t)-\exp(-k_2 t)\}$$

これを積分して、t=0 で[C]=0 の条件を課すと、

$$[\mathrm{C}] = \frac{k_1 k_2[\mathrm{A}]_0}{k_2-k_1}\left\{\frac{\exp(-k_2 t)}{k_2} - \frac{\exp(-k_1 t)}{k_1} + \frac{1}{k_1} - \frac{1}{k_2}\right\}$$

が求まる。$t\to\infty$で[C]=[A]$_0$になることが検算になる。