Note Title

Matrixformulierung der Reaktionskinetik

$$S_1 \underset{b}{\overset{a}{\rightleftharpoons}} S_2 \qquad T = \begin{bmatrix} -a & b \\ a & -b \end{bmatrix}$$

P_2

① Eigenwerte:

$$\begin{vmatrix} -a-\lambda & b \\ a & -b-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$\det(T - \lambda E) = 0$$

$$(a+\lambda)(b+\lambda) - ab = 0$$

$$\lambda^2 + \lambda(a+b) = 0$$

$$\hookrightarrow \boxed{\lambda_1 = 0}, \quad \boxed{\lambda_2 = -a-b}$$

② Eigenvektoren:

$\underline{\underline{\text{zu } \lambda_1:}}$

$$(T - \lambda_1 E) \cdot \vec{v}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} -a & b \\ a & -b \end{bmatrix} \begin{pmatrix} v_{1,1} \\ v_{1,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Longrightarrow \left.\begin{aligned} -a \cdot v_{1,1} + b \cdot v_{1,2} &= 0 \\ +a \cdot v_{1,1} - b\, v_{1,2} &= 0 \end{aligned}\right\} \Longrightarrow \boxed{v_{1,2} = \frac{a}{b} v_{1,1}}$$

$\underline{\underline{\text{zu } \lambda_2:}}$

$$\begin{bmatrix} b & b \\ a & a \end{bmatrix} \cdot \vec{v}_2 = \vec{0}$$

$$\longrightarrow \left.\begin{aligned} b \cdot v_{2,1} + b \cdot v_{2,2} &= 0 \\ a \cdot v_{2,1} + a \cdot v_{2,2} &= 0 \end{aligned}\right\} \longrightarrow v_{2,2} = -v_{2,1}$$

③ Fundamentalsystem:

$$\boxed{[\vec{S}] = \sum_i c_i \, \vec{v}_i \cdot e^{\lambda_i t}}$$

$$[\vec{S}] = \begin{pmatrix} [S_1] \\ [S_2] \end{pmatrix} = c_1 \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ a/b \cdot x_1 \end{pmatrix} \cdot e^{0 \cdot t} + c_2 \begin{pmatrix} x_2 \\ -x_2 \end{pmatrix} \cdot e^{-(a+b)t}$$

$$[x_1] = [x_2] = \frac{\text{mol}}{\ell}$$

$$\boxed{\begin{aligned} [S_1] &= c_1 \cdot x_1 + c_2 \cdot x_2 \cdot e^{-(a+b)t} \quad (1) \\ [S_2] &= c_1 \cdot \frac{a}{b} \cdot x_1 - c_2 \cdot x_2 \cdot e^{-(a+b)t} \quad (2) \end{aligned}}$$

(4) Koeffizienten können zusammengefasst werden:

$$c_1 x_1 =: \tilde{c}_1 \quad , \quad c_2 x_2 =: \tilde{c}_2$$

Randbedingung: $t = 0$ liefert $[S_1] = [S_1]_0$ (3)
$[S_2] = 0 \ \mathrm{mol}/\ell$ (4)

$\hookrightarrow$ aus (3): $\tilde{c}_1 + \tilde{c}_2 = [S_1]_0$

$\hookrightarrow$ in (4): $0 = \tilde{c}_1 \frac{a}{b} - \tilde{c}_2 = \tilde{c}_1 \frac{a}{b} - \left([S_1]_0 - \tilde{c}_1\right)$

$$\Rightarrow \tilde{c}_1 = \frac{b}{a+b} \cdot [S_1]_0 \quad , \quad \tilde{c}_2 = \frac{a}{a+b} \cdot [S_1]_0$$

Vergleich der Koeffizienten von (1), (2) mit

$$[S_1] = \frac{[S_1]_0 k_{-1}}{k_1 + k_{-1}} + \frac{[S_1]_0 k_1 e^{-(k_1 + k_{-1})t}}{k_1 + k_{-1}}$$

<u>Liefert:</u> (analog für $[S_2](t)$!)

$$\boxed{\begin{aligned} x_1 = x_2 &= [S_1]_0 \\ c_1 = \frac{b}{a+b} \quad &, \quad c_2 = \frac{a}{a+b} \end{aligned}}$$