



Modelowanie reakcji chemicznych

Przykładowe ćwiczenia w Excelu i Modellusie

© 2007 IT for US – Projekt jest finansowany przy wsparciu Komisji Europejskiej, nr grantu 119001-CP-1-2004-1-PL-COMENIUS-C21. Materiały są odzwierciedleniem poglądów autorów, Komisja Europejska nie jest odpowiedzialna za wykorzystanie informacji w nich zawartych.

 <p>Education and Culture Socrates</p> 	<p>IT for US</p> <p>Information Technology for Understanding Science</p> <p>Socrates Comenius programme Action 2.1 - Training of School Education Staff 119001-CP-1-2004-1-PL-COMENIUS-C21</p>
--	---

I. Wprowadzenie

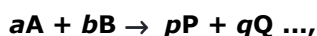
Zaproponowany zestaw ćwiczeń ilustruje sposób tworzenia modeli matematycznych reakcji chemicznych na podstawie równań kinetycznych, które opisują zależność szybkości reakcji chemicznej od stężeń substancji chemicznych, które biorą w niej udział.

1. Podstawy teoretyczne

Szybkość reakcji chemicznej jest wielkością fizyczną, która określa jak szybko zmienia się stężenie produktu lub substratu.

Szybkością reakcji chemicznych zajmuje się dziedzina chemii zwana kinetyką chemiczną. Pojęcia i metody związane z tą dyscypliną mają zastosowanie w wielu innych dziedzinach, od biologii po ochronę środowiska.

Złota księga IUPAC definiuje **szybkość reakcji** opisaną ogólnym równaniem:



przebiegającej w układzie zamkniętym w warunkach stałej objętości, jako

$$v = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{p} \frac{d[P]}{dt} = \frac{1}{q} \frac{d[Q]}{dt}$$

gdzie $[X]$ oznacza stężenie substancji chemicznej X i wyrażane jest zazwyczaj w mol/L. Przyjmując za jednostkę czasu sekundę otrzymujemy jednostkę szybkości (mol/L)/s.

Równanie kinetyczne reakcji chemicznej określa zależność szybkości reakcji od stężeń (lub ciśnień) reagentów.

Dla większości reakcji chemicznych typu $A + B \rightarrow C$, równanie kinetyczne ma postać

$$v = k [A]^n [B]^m$$

gdzie k jest **stałą szybkości**, która zależy od temperatury, wielkości powierzchni itd.

Wykładniki potęg n i m określają **rzęd reakcji** i zależą od **mechanizmu reakcji**. Współczynniki stechiometryczne w równaniu reakcji są często równe współczynnikom stechiometrycznym. Równanie kinetyczne może mieć bardziej skomplikowaną postać i zawierać inne czynniki.

Równania kinetyczne mogą być zapisane w postaci **równań różniczkowych**, co pozwala obliczyć stężenia reagujących substancji w każdej chwili przebiegu reakcji. Na przykład, dla reakcji $A \rightarrow B$, opisaną równaniem kinetycznym $v = k [A]$, otrzymujemy:

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

Rozwiązaniem tego równania jest funkcja:

$$[A] = [A]_0 e^{-kt}$$

Jedną z form rozwiązania numerycznego jest metoda Eulera, która w tym konkretnym przypadku jest następująca:

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

$$\frac{\Delta[A]}{\Delta t} \approx -k[A]$$

$$\frac{[A]_{t+\Delta t} - [A]_t}{\Delta t} = -k[A]_t$$

$$[A]_{t+\Delta t} - [A]_t = -k[A]_t \times \Delta t$$

$$[A]_{t+\Delta t} = [A]_t - k[A]_t \times \Delta t$$

2. Wprowadzane pojęcia

- Szybkość reakcji
- Równanie kinetyczne
- Stała szybkości
- Rząd reakcji
- Równanie różniczkowe

3. Inne informacje

W Internecie można znaleźć przykłady interaktywnego modelowania reakcji chemicznych na stronach:

Kinetyka i równowaga reakcji: Odwracalność reakcji pierwszego rzędu:
<http://www.bpreid.com/applets/reversible.html> .

Symulacje reakcji chemicznych <http://www.science.uwaterloo.ca/~cchieh/cact/trios/simulation.html#reaction>

Symulacje w zakresie kinetyki chemicznej <http://www.chem.uci.edu/undergrad/applets/sim/simulation.htm>

II. Podejście dydaktyczne

1. Kontekst pedagogiczny

Ćwiczenia przedstawione w tym module są przeznaczone dla uczniów **szkół ponadgimnazjalnych, studentów pierwszego roku i nauczycieli szkół średnich**, na lekcjach chemii lub matematyki.

Nie zostały one zaprojektowane w odniesieniu do konkretnego programu nauczania. Ilustrują one w prosty sposób, jak dwa interaktywne narzędzia (Modellus i arkusz kalkulacyjny np. Excel) mogą być zastosowane do modelowania zjawisk fizycznych. Mogą one być **szczególnie przydatne w jednoczesnym szkoleniu nauczycieli chemii i matematyki**, promując interdyscyplinarność, pobudzając do refleksji na temat pojęć i ich reprezentacji oraz do **wprowadzenia prostych metod numerycznych**.

2. Trudności ucznia

Trudności, które napotykają uczniowie obejmują:

- **Interpretację wykresów**, w których czas jest zmienną niezależną, przedstawioną na osi poziomej.
- Zastosowanie **szybkości zmian** do zdefiniowania odpowiednich **równań iteracyjnych**.
- Przyjęcie założenia, że równania kinetyczne są wyrażeniami, w których występują współczynniki stechiometryczne.
- Przyjęcie założenia, że stan równowagi oznacza „koniec reakcji chemicznej”.

3. Ewaluacja wykorzystania TI

Komputery są obecnie najbardziej popularnym narzędziem badawczym stosowanym w prawie wszystkich aspektach nauki, od pomiarów i modelowania do pisanie i komunikowania się w czasie rzeczywistym. Powinno być rzeczą naturalną stosowanie komputera w nauczaniu przedmiotów przyrodniczych.

Arkusz kalkulacyjny jest wspaniałym narzędziem do wykonywania wielu powtarzających się obliczeń, na przykład przyrostowej zmiany wartości zmiennych, i graficznej prezentacji danych. W kinetyce i równowadze chemicznej, rozwiązania numeryczne równań kinetycznych mogą być łatwo zaimplementowane przez użycie **równań iteracyjnych** typu:

nowa wartość = stara wartość + szybkość zmiany x mały przedział czasu

4. Uwagi dla nauczyciela

Dobra organizacja pracowni szkolnej jest istotnym elementem decydującym o sukcesie nauczania, szczególnie, gdy używamy zestawu narzędzi takich jak komputery i programy komputerowe.

Większość rozwiązań dotyczących organizacji pracowni szkolnej, które dają dobre rezultaty, uwzględnia pracę uczniów zarówno indywidualną jak i w małych grupach, oraz wykład nauczycielski dla całej klasy.

Zwykle nauczyciele rozpoczynają zajęcia stosując metody adresowane do całej klasy z wykorzystaniem projektora multimedialnego. Jest prawie zawsze dobrym pomysłem poproszenie jednego lub więcej uczniów o pracę przy komputerze podłączonym do projektora. Dostarcza to nauczycielowi bezpośrednich informacji na temat trudności uczniów podczas używania programu, oraz pozwala dostosować tempo wyjaśniania i wykonywania ćwiczeń do możliwości uczniów.

Wszyscy nauczyciele wiedzą z doświadczenia, że dla większości uczniów wykonywanie pisanych instrukcji nawet kilkudzaniowych jest zwykle trudne. Aby pokonać te trudności, nauczyciel może poprosić uczniów, aby przeczytali ćwiczenia przed rozpoczęciem ich wykonywania a następnie inicjuje dyskusję na temat wykorzystania komputera w wykonywanym ćwiczeniu. *Jak wynika z praktyki, uczniowie powinni przystąpić do wykonania ćwiczenia wtedy, kiedy wiedzą co będą robić w ćwiczeniu. Wówczas konsultują się w sprawach szczegółowych.*

III. Ćwiczenia

Modelowanie najprostszych reakcji chemicznych

Na pierwszej stronie przedstawione zostało ćwiczenie wykonane w arkuszu kalkulacyjnym, ilustrujące w jaki sposób tworzyć model reakcji pierwszego rzędu.

Wyjaśnienie podstawowego rozumowania dotyczącego numerycznego rozwiązywania równań: od definicji różniczki do jej przybliżenia.

Wprowadzenia do równań iteracyjnych, które rozwiązują w sposób przybliżony równanie $v = -dA/dt$.

Nie zapomnij zdefiniować parametrów o określonych nazwach. W tym modelu zostały zdefiniowane cztery parametry: delta_t w komórce C4 (krok czasowy do obliczeń numerycznych); k w komórce C5 (stała szybkości); A0 w komórce C6 i B0 w komórce C7 (stężenie początkowe substratu A i produktu B)

Porównanie modelu w Excelu i modelu w Modellusie.

W Modellusie równanie kinetyczne jest wyrażone w postaci funkcji stężenia substratu A ...

... a szybkość zmian stężenia substratu A w postaci równania różniczkowego.

Na trzeciej stronie serii ćwiczeń, poprawiony został model w Modellusie poprzez wprowadzenie małej zmiany w celu uzyskania wykresu zarówno stężenia substratu A jak i produktu B.

Może być użyteczne wprowadzenie podobnych zmian do modelu wykonanego w Excelu.

B.1 OK I need to do this again... I need tutor support

Modelling chemical reactions: numerical solution of the equation of the reaction rate

1. Let's assume that variable A represents the concentration of the reactant and that variable B the concentration of the product in the chemical reaction $A \rightarrow B$.

2. The rate of the reaction, v , is a quantity that measures how fast A is transformed into B.

3. Experimentally one can find which factors influence the rate v . For certain reactions, the rate is proportional to the concentration A.

4. If it is a direct proportion, $v = k \cdot A$, where k is a constant of proportionality. This equation is called the rate law of the reaction.

5. The instantaneous rate of change of reactant A is the derivative of the concentration A in order to time, $v = dA/dt$. It is possible to compute approximate values of the rate of change using small time increments, from step $t = \Delta t$.

6. Solving this equation to compute the "new values of A" at instant $t + \Delta t$, A ($t = \Delta t$) knowing the value of A at the previous instant, A(t), and the rate of change, v , we obtain:

$$A(t + \Delta t) = A(t) - v \cdot \Delta t$$

$$A(t + \Delta t) = A(t) - k \cdot A(t) \cdot \Delta t$$

7. The values obtained with this iterative equation are closer and closer to the correct solution as Δt is smaller and smaller (the approximation gets better as the increments Δt gets smaller...)

8. Since the concentration A is decreasing during the reaction, v is negative... In order to avoid the use of negative values, the instantaneous rate of change of A is usually written as $v = -dA/dt$. Then, the last iterative equation becomes $A(t + \Delta t) = A(t) + v \cdot \Delta t$.

B.2 OK I need to do this again... I need tutor support

Modelling chemical reactions: numerical solution of the equation of the reaction rate in Excel and in Modellus

1. Left: In Excel: the numerical solution of the mathematical model of the reaction rate of the reaction $A \rightarrow B$. The change in the concentration A, in each step, is $v \cdot \Delta t$. This model uses the iterative equation: new value = old value + rate of change \cdot small time interval.

2. Right: In Modellus: the rate law is expressed as a function ($v = k \cdot A$) and the rate of change is simply the differential equation $dA/dt = -v$.

The values obtained with the Modellus model (below) are closer to the exact solution of the differential equation $dA/dt = -k \cdot A$. On the Excel model (left), changing delta_t to a smaller value, you will get a better approximation. Check it with cells C2 = 0.02 (you will need also to "Fill Down" 10 times more cells...).

The rate law: $v = k \cdot A$

The instantaneous rate of change of A is negative, since A is decreasing at rate v .

B.3 OK I need to do this again... I need tutor support

Modelling non-reversible chemical reactions in Modellus

1. Let's now make minor changes on the Modellus model of the chemical reaction $A \rightarrow B$.

2. The reaction has a rate law $v = k \cdot A$.

3. The concentration of reactant A is decreasing at a rate v .

4. ... and the concentration of product B is increasing at the same rate, v .

5. Starting from initial conditions ($t = 0$) where there is only reactant A, A will be completely transformed into B.

6. If at time $t = 0$ there is an amount of the product B, reactant A will also be completely transformed into B.

7. What happens if at $t = 0$ the concentrations of A and B are equal (i.e., $A = B = 1$)? Can you sketch the graphs of concentrations A and B as functions of time?

8. Check you conclusions with the model.

Modelowanie odwracalnych reakcji chemicznych i zmiana stanu równowagi

Te dwa ćwiczenia pokazują jak modelować reakcje odwracalne w Modellusie.

Odwracalna reakcja chemiczna może być rozważana jako dwie jednoczesne reakcje, $A \rightarrow B$ i $B \rightarrow A$, każda z nich opisywana własnym równaniem kinetycznym (reakcji pierwszego rzędu w przykładzie na stronie pierwszej) i własnymi stałymi szybkości, k_1 i k_2 .

Uczeń proszony jest o:

1. zmianę wartości stałych szybkości i dyskusję jak te zmiany wpływają na czas potrzebny do osiągnięcia równowagi;
2. dobór różnych wartości warunków początkowych i dyskusję co się stanie;
3. analizę specyficznych przypadków warunków początkowych i wartości stałych szybkości.

Drugie ćwiczenie z tej serii pozwala uczniowi zobaczyć i przeanalizować w jaki sposób zareaguje układ na zmiany stężenia substratu A i produktu B.

Aby zmienić stężenie substratu A podczas działania modelu, należy przesunąć kursor pionowego paskā, który reprezentuje stężenie A. Można to zrobić bez zatrzymywania działania modelu lub po naciśnięciu przycisku Pauza. Jest jednak zalecane zatrzymanie modelu w każdym przypadku, gdy potrzebujemy zmienić stężenie dowolnego związku chemicznego.

Dla uczniów może stanowić wyzwanie zaadaptowanie poprzedniego modelu wykonanego w Excelu do tej odwracalnej reakcji.

Będą musieli oni dodać drugi warunek do zmiany stężenia każdego reagenta:

$$A(t + \Delta t) = A(t) - k_1 \times A(t) \times dt + k_2 B(t) \times dt$$

$$B(t + \Delta t) = B(t) + k_1 \times A(t) \times dt - k_2 \times B(t) \times dt$$

Modelling reversible chemical reactions in Modellus

$A \rightleftharpoons B$

1. You will now make a model of the simplest reversible reaction: $A \rightleftharpoons B$. I.e. a reaction where a chemical species A is transformed into a chemical species B, and, at the same time, B is also transformed into A.
2. The direct reaction, $A \rightarrow B$, has a rate law $v_1 = k_1 \times A$, and the inverse reaction, $B \rightarrow A$, has a rate law $v_2 = k_2 \times B$. (According to the law of mass action, the rate law is proportional to the reactants. See, e.g., http://en.wikipedia.org/wiki/Law_of_mass_action.)
3. Starting from initial conditions ($t = 0$) where there is only reactant A, A will be transformed into B, and B will also react to be transformed into A, until both concentrations become constant. Equilibrium is reached after a certain time, **stop** the simulation and change the value of the **rate constants**. Change the **rate constants** to check how they affect the time taken to reach the equilibrium.
4. If at time $t = 0$ only species B is present, will the reaction take place? What do you expect to happen to the concentration of the species A?
5. What happens if at $t = 0$ the concentrations of A and B are equal ($k_1 = k_2 = 1$) but the rate constants are **different**? Can you check the graphs of concentrations A and B as functions of time? Check your conclusions with the model.
6. And what happens if the rate constants are equal? Check and discuss...

Chemical equilibrium and change in concentration in equilibrium

$A \rightleftharpoons B$

1. Let's look again the model of the simplest reversible reaction $A \rightleftharpoons B$.
2. Modellus allows the user to interactively change any independent parameter or any variable that is changing according to a certain instantaneous rate of change. For example, the user can change the value of the concentration A while the model is running.
3. After the system reached equilibrium and while the model is running, press the **Pause** button.
4. Use the mouse to **increase the current value of the concentration of reactant A**.
5. Press the **Pause** button again...
6. How does the system react to this **perturbation** to the equilibrium?
7. And how would the system react if the concentration of species B was increased instead of species A?
8. Analyse the graphs of the **velocity of the direct and inverse reactions** (right). Are these graphs coherent with the **perturbation** to the equilibrium? Check your reasoning by chemical equilibrium principles to chemical equilibrium (see, e.g., http://en.wikipedia.org/wiki/La_Ch%C3%AAtelier%27s_principle).

Więcej przykładów dotyczących reakcji odwracalnych

Kolejne dwa ćwiczenia ilustrują sposób modelowania bardziej skomplikowanych reakcji odwracalnych w Modellusie. Przykłady dotyczą reakcji chemicznych z więcej niż dwoma substratami (w pierwszym przykładzie) i więcej niż dwoma produktami (w drugim przykładzie).

W celu uproszczenia modeli, założono, że wszystkie reakcje zachodzą zgodnie z kinetyką reakcji pierwszego rzędu.

Uczeń proszony jest o:

1. zmianę wartości stałych szybkości i dyskusję jak te zmiany wpływają na czas potrzebny do osiągnięcia równowagi;
2. dobór różnych wartości warunków początkowych i dyskusję co się stanie, szczególnie wtedy, gdy na początku obecny jest tylko jeden substrat;
3. analizę specyficznych przypadków warunków początkowych i wartości stałych szybkości;
4. przewidywanie co się będzie działo dla różnych warunków początkowych i odpowiednich stałych szybkości.

Uczniowie mogą również zostać sprowokowani do analizy, jak zareaguje system w sytuacji, gdy po osiągnięciu stanu równowagi, jeden ze związków jest dodawany do lub odprowadzany ze środowiska reakcji. Na przykład, w przypadku reakcji $A + B \rightleftharpoons C$, co stanie się ze stężeniem związku B gdy jest dodawany substrat A lub gdy jest on odprowadzany ze środowiska reakcji? Lub, w przypadku reakcji $A \rightleftharpoons B + C$, co stanie się ze stężeniem związku B, jeśli zwiększymy lub zmniejszymy stężenie związku C?

Uczniowie mogą również zaadoptować poprzedni model wykonany w Excelu do przedstawionych reakcji. Mogą oni dostosować model do następujących równań iteracyjnych dla pierwszej reakcji:

$$A(t + \Delta t) = A(t) - k_1 \times A(t) \times B(t) \times dt + k_2 \times C(t) \times dt$$

$$B(t + \Delta t) = B(t) - k_1 \times A(t) \times B(t) \times dt + k_2 \times C(t) \times dt$$

$$C(t + \Delta t) = C(t) + k_1 \times A(t) \times B(t) \times dt - k_2 \times C(t) \times dt$$

Modelling reversible chemical reactions in Modellus, with two "reactants" and one "product"

1. On the model shown on the right, species A reacts with B to give C, and, at the same time, C is also transformed into A and B.

2. The direct reaction, $A + B \rightarrow C$, has a rate law $v_1 = k_1 \times [A] \times [B]$ and the inverse reaction, $C \rightarrow A + B$, has a rate law $v_2 = k_2 \times [C]$.

3. Starting from initial conditions ($t = 0$) where there is only reactants A and B, A and B will be transformed into C and C into A and B, until all concentrations become constant. Equilibrium is reached after a certain time, that depends on the value of the rate constants, k_1 and k_2 . Change the values of these constants to check how they affect the time taken to reach the equilibrium...

4. If at some $t = 0$ only species C is present, will the reaction take place? What do you expect to happen to the concentration of the species A and B? Explain your reasoning and check with the model.

5. What happens if at $t = 0$ the concentrations of A, B and C are equal (e.g., $A = B = C = 1$) but the rate constants are different? Can you sketch the graphs of concentrations A, B and C as functions of time? Check your conclusions with the model.

6. And what happens if the rate constants are equal? Check and discuss...

Modelling reversible chemical reactions in Modellus, with one "reactant" and two "products"

1. On the model shown on the right, species A reacts to give B and C, and, at the same time, B and C reacts to give again A.

2. The direct reaction, $A \rightarrow B + C$, has a rate law $v_1 = k_1 \times [A]$ and the inverse reaction, $B + C \rightarrow A$, has a rate law $v_2 = k_2 \times [B] \times [C]$.

3. Starting from initial conditions ($t = 0$) where there is only reactant A, A will be transformed into B and C, and B and C will be transformed into A, until all concentrations become constant. Equilibrium is reached after a certain time, that depends on the value of the rate constants, k_1 and k_2 . Change the values of these constants to check how they affect the time taken to reach the equilibrium...

4. If at some $t = 0$ only species A is present, will the reaction take place? What do you expect to happen to the concentration of the species B and C?

5. What happens if at $t = 0$ the concentrations of A, B and C are equal (e.g., $A = B = C = 1$) but the rate constants are different? Can you sketch the graphs of concentrations A, B and C as functions of time? Check your conclusions with the model.

6. And what happens if the rate constants are equal? Check and discuss...

Modelowanie reakcji następczych

Trzy ostatnie ćwiczenia ilustrują sposób tworzenia modelu reakcji następczych w Modellusie. W celu uproszczenia modelu, zakładamy, że wszystkie reakcje są reakcjami pierwszego rzędu.

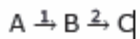
Uczeń proszony jest o:

1. dobór różnych wartości warunków początkowych, przewidywanie i dyskusję co się stanie;
2. analizę specyficznych przypadków warunków początkowych;
3. przewidywanie i dyskusję co się będzie działo dla różnych warunków początkowych i odpowiednich stałych szybkości.

Dyskusja proponowana w § 9 może być wykorzystana przez nauczyciela do wprowadzenia pojęcia etapu determinującego (np. najwolniejszy etap reakcji następczych).

Jak proponowano w poprzednich ćwiczeniach, uczeń może także:

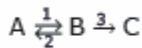
- analizować zachowanie systemu reakcji, po osiągnięciu równowagi, w przypadku zwiększenia lub zmniejszenia stężenia jednego z reagentów, co jest ilustracją reguły Le Chateliera;
- budować modele reakcji następczych w arkuszu kalkulacyjnym Excel. Wymaga to modyfikacji poprzednich modeli zgodnie z równaniami iteracyjnymi:



$$A(t + \Delta t) = A(t) - k_1 \times A(t) \times dt$$

$$B(t + \Delta t) = B(t) + k_1 A(t) \times dt - k_2 \times B(t) \times dt$$

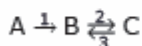
$$C(t + \Delta t) = C(t) + k_2 \times B(t) \times dt$$



$$A(t + \Delta t) = A(t) - k_1 \times A(t) \times dt + k_2 \times B(t) \times dt$$

$$B(t + \Delta t) = B(t) + k_1 A(t) \times dt - k_2 \times B(t) \times dt - k_3 \times B(t) \times dt$$

$$C(t + \Delta t) = C(t) + k_3 \times B(t) \times dt$$



$$A(t + \Delta t) = A(t) - k_1 \times A(t) \times dt$$

$$B(t + \Delta t) = B(t) + k_1 A(t) \times dt - k_2 \times B(t) \times dt + k_3 \times C(t) \times dt$$

$$C(t + \Delta t) = C(t) + k_2 \times B(t) \times dt - k_3 \times C(t) \times dt$$

Modelling two successive chemical reactions in Modellus, first and second step irreversible

1. The model shown on the right represents two successive irreversible reactions: species A reacts to give B, and B reacts to give C.
2. The first reaction, $A \rightarrow B$, has a rate law $v_1 = k_1 \times A$, and the second reaction, $B \rightarrow C$, has a rate law $v_2 = k_2 \times B$.
3. The concentration of species A is decreasing at a rate v_1 .
4. ... and the concentration of species B is increasing at a rate v_1 (receiving from A) and decreasing at a rate v_2 (forming C)...
5. ... and the concentration of species C is increasing at a rate v_2 (receiving from B)...
6. Starting from initial conditions ($t = 0$) where there is only reactant A, A will be completely transformed into B and B into C...
7. What happens if at $t = 0$ there is any amount of the species A and B but no C? Discuss, explain your reasoning, predict and check.
8. What happens if at $t = 0$ there is any amount of the species B but no A and C? Discuss, explain your reasoning, predict and check.
9. What happens if at $t = 0$ there is any amount of the species A and reaction 1 occurs at a "high" rate and reaction 2 at a "low" rate (e.g., $k_1 = 1.0$ and $k_2 = 0.1$)? Discuss, explain your reasoning, predict and check.

Modelling successive chemical reactions in Modellus, first step reversible, second irreversible

1. The model shown on the right represents successive reactions: species A reacts reversibly to give B and B reacts irreversibly to give C.
2. The concentration of species A is decreasing at a rate v_1 (reaction $A \rightarrow B$) and increasing at a rate v_2 (reaction $B \rightarrow A$)...
3. ... and the concentration of species B is increasing at a rate v_1 (receiving from A) and decreasing at a rate v_2 (forming C, reaction $B \rightarrow C$)...
4. ... and the concentration of species C is increasing at a rate v_3 (receiving from B, reaction $B \rightarrow C$)...
5. What happens if at $t = 0$ there is any amount of the species A and B but no C? Discuss, explain your reasoning, predict and check.
6. What happens if at $t = 0$ there is any amount of the species B but no A and C? Discuss, explain your reasoning, predict and check.
7. What happens if at $t = 0$ there is any amount of the species C but no A and B? Discuss, explain your reasoning, predict and check.

Modelling successive chemical reactions in Modellus, first step irreversible, second reversible

1. The model shown on the right represents successive reactions: species A reacts irreversibly to give B and B reacts reversibly to give C.
2. The concentration of species A is decreasing at a rate v_1 (reaction $A \rightarrow B$)...
3. ... and the concentration of species B is increasing at a rate v_1 (receiving from A), decreasing at a rate v_2 (forming C, reaction $B \rightarrow C$) but also increasing at a rate v_3 (receiving from C, reaction $C \rightarrow B$)...
4. ... and the concentration of species C is increasing at a rate v_2 (receiving from B, reaction $B \rightarrow C$) and decreasing at a rate v_3 (forming B, reaction $C \rightarrow B$)...
5. What happens if at $t = 0$ there is any amount of the species A and B but no C? Discuss, explain your reasoning, predict and check.
6. What happens if at $t = 0$ there is any amount of the species B but no A and C? Discuss, explain your reasoning, predict and check.
7. What happens if at $t = 0$ there is any amount of the species C but no A and B? Discuss, explain your reasoning, predict and check.