

(以下の式では、濃度を表す[]は全て省略している。すなわちイタリック体(斜め字) A は A の濃度である[A]を示していることを頭に入れておくこと。)

1. 一次反応式の誘導

$$\frac{dA}{dt} = -k_1 A \quad (1-1)$$

$$\frac{dA}{A} = -k_1 dt \quad (1-2)$$

$$\int_{A_0}^A \frac{dA}{A} = -k_1 \int_0^t dt \quad (1-3)$$

(3)式を積分すると

$$[\ln A]_{A_0}^A = -k_1 [t]_0^t \quad (1-4)$$

$$\ln A - \ln A_0 = -k_1 t \quad (1-5)$$

$$\ln(A/A_0) = -k_1 t \quad (1-6)$$

2. 一次反応の半減期

半減期とは、ある化学種 A の濃度が半減するのに必要な時間で定義される。そのため、(1-6)式の A を $A_0/2$ を代入して計算する。

$$\ln\left(\frac{A_0/2}{A_0}\right) = -k_1 \tau_{1/2} \quad (2-1)$$

$$\tau_{1/2} = -\ln\left(\frac{1}{2}\right)/k_1 \quad (2-2)$$

$$\tau_{1/2} = \ln 2/k_1 \quad (2-3)$$

3. 二次反応速度式の誘導(I)

$$\frac{dA}{dt} = -k_2 A^2 \quad (3-1)$$

$$\frac{dA}{A^2} = -k_2 dt \quad (3-2)$$

$$\int_{A_0}^A \frac{dA}{A^2} = -k_2 \int_0^t dt \quad (3-3)$$

ここで、 $\int x^n dx = \frac{1}{n+1} x^{n+1} (n \neq -1)$ を用いると

$$\left[-\frac{1}{A}\right]_{A_0}^A = -k_2 [t]_0^t \quad (3-4)$$

$$-\frac{1}{A} + \frac{1}{A_0} = -k_2 t \quad (3-5)$$

$$\frac{1}{A} = k_2 t + \frac{1}{A_0} \quad (3-6)$$

4. 二次反応速度式の誘導(II)

$$\frac{dA}{dt} = -k_2 AB \quad (4-1)$$

ここで a, b を化学種 A, B の初濃度、 x を時間 t における A, B の変化量とすると、 $A = a - x, B = b - x$ で表される。これで、(4-1) 式を置き換えると、(4-2) 式となる。

$$\frac{d(a-x)}{dt} = -k_2(a-x)(b-x) \quad (4-2)$$

$$-\frac{dx}{dt} = -k_2(a-x)(b-x) \quad (4-3)$$

$$-\frac{dx}{(a-x)(b-x)} = -k_2 dt \quad (4-4)$$

$$\frac{dx}{(a-x)(b-x)} = k_2 dt \quad (4-5)$$

ここで、 $\frac{1}{(a-x)(b-x)} = \frac{1}{b-a} \left(\frac{1}{(a-x)} - \frac{1}{(b-x)} \right)$ と変形できることを利用して、

$$\frac{1}{b-a} \left(\frac{dx}{(a-x)} - \frac{dx}{(b-x)} \right) = k_2 dt \quad (4-6)$$

この式を、上に示した条件を考えて積分する。

$$\frac{1}{b-a} \int_0^x \frac{dx}{(a-x)} - \frac{dx}{(b-x)} = k_2 \int_0^t dt \quad (4-7)$$

ここで、 $\int \frac{dx}{(a-x)} = -\ln(a-x)$ であることを考慮して

$$\frac{1}{b-a} [-\ln(a-x) + \ln(b-x)]_0^x = k_2 [t]_0^t \quad (4-8)$$

$$\frac{1}{b-a} [-\ln(a-x) + \ln a + \ln(b-x) - \ln b] = k_2 t \quad (4-9)$$

$$\frac{1}{b-a} \ln \frac{a(b-x)}{b(a-x)} = k_2 t \quad (4-10)$$