

## Relazione 1: simulazione di cinetiche di reazioni chimiche

Nome e Cognome: .....

N. matricola: .....

Reazione del primo ordine:  $R \rightarrow P$

La concentrazione del  $[R](t)$  in funzione del tempo è descritta dalla funzione:

Sono state effettuate due simulazioni con i seguenti parametri:

simulazione	$[R]_0$	$[P]_0$	$k_1$	$t_{1/2}$	Tempo tot
1					
2					

I grafici che mostrano l'andamento di  $[R](t)$  e  $[P](t)$  sono riportati nelle Figure.....

Commento: (max 2000 caratteri)



Reazione del secondo ordine:  $R+R \rightarrow P$

L'equazione che descrive la comparsa del prodotto nel tempo  $[P](t)$  è:

Sono state effettuate due simulazioni con i seguenti parametri:

simulazione	$[R]_0$	$[P]_0$	$k_2$	$t_{1/2}$	Tempo tot
1					
2					

I grafici che mostrano l'andamento di  $[R](t)$  e  $[P](t)$  sono riportati nelle Figure.....

Commento: (max 2000 caratteri)



Meccanismo di Reazione catalitico:

Le equazioni differenziali che descrivono l'evoluzione nel tempo delle specie coinvolte nel meccanismo catalitico sono:



La simulazione dei “dati sperimentali” forniti dal docente con il programma kintecus mostra che il meccanismo catalitico è caratterizzato dai seguenti parametri:

$[R]_o$	$[C]_o$	$[P]_o$	$k_a$	$k_b$	$k_c$	Tempo Tot

In Fig. .... sono riportati gli andamenti in funzione del tempo delle concentrazioni fornite dai docenti in funzione di quelle da noi ottenute simulando i dati con il programma Kintecus.

Commenti alle figure: (max 4000 caratteri)



NB: Tempo Tot = tempo totale per cui è stata seguita la reazione.