Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»

Факультет цифровых технологий и химического инжиниринга

Кафедра информационных компьютерных технологий

**ОТЧЕТ ПО ПРАКТИЧЕСКОЙ РАБОТЕ № 14**

**ПО КУРСУ**

**«ЦИФРОВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ»:**

**«Название работы из ведомости»**

Ведущий преподаватель

Ст. преподаватель Скичко Е.А.

**СТУДЕНТ группы КС-20** Мелехин А.А.

**Москва**

**2024**

# **Задание**

**Задание 1**. Рассчитайте с использованием данных БД «Third Millennium…» тепловой эффект реакции синтеза метанола *СО + 2Н2 = СН3ОН* при 525 K. Какова теплоемкость метанола при этой температуре?

**Задание 2**. Определить изменение Энтропии при смешивании Газа и Газа ; *T = 298 K*. Начальное давление газов равно *101325 Па.* Принять, что данные вещества подчиняются законам идеальных газов.

**Задание 3**. Рассчитайте с помощью полиномов NASA энтропию при 250 K для вещества *C3H4 (ALLENE)*.

**Теоретическое обоснование решения**

**Термодинамическим процессом** называется любое изменение состояния системы, характеризующееся изменением ее термодинамических параметров.

**«Нулевой» закон термодинамики:** для любой термодинамической системы существует состояние термодинамического равновесия, которое при фиксированных внешних условиях самопроизвольно достигается с течением времени.

**Функции состояния** - U, H, S, G, А, Cp, Cv. Изменение функции состояния не зависит от пути, а только от конечного и начального состояния системы.

**Функции пути** - теплота процесса (Q) и механическая работа (W). Бесконечно малое количество нельзя обозначить дифференциалом. Только буквой «дельта»: δQ и δW.

**Формулировка Кирхгофа:** Изменение внутренней энергии закрытой системы в бесконечно малом (начальное и конечное состояние бесконечно близки) равновесном процессе равно разности количества теплоты и работы δW, совершаемой системой

**Закон Гесса:** тепловой эффект химической реакции при P, T=const зависит только от вида и состояния исходных веществ и продуктов реакции и не зависит от пути её протекания.

Qp = ΔHp,T

**Энтальпия** образования простых веществ в устойчивых стандартных состояниях равна нулю.

**Следствия:**

•Тепловой эффект химической реакции равен разности сумм теплот образования (ΔHf) продуктов реакции и исходных веществ, умноженных на стехиометрические коэффициенты (ν):

•Тепловой эффект химической реакции равен разности сумм теплот сгорания (ΔHc) исходных веществ и продуктов реакции, умноженных на стехиометрические коэффициенты (ν):

Расчетный метод определения энтальпии образования и реакции (полиномы NASA):

где - стандартная энтальпия при заданной температуре, Дж/моль,

- стандартная энтальпия образования при 298 К, Дж/моль,

*-* стандартная теплоёмкость при постоянном давлении, Дж/моль К.

В полиномах формата NASA 7 первых коэффициентов для высокотемпературных диапазонов (1000 – 6000 К), 7 последующих для низкотемпературного диапазона (200 – 1000 К).

(определение энтропии) Существует экстенсивная функция состояния, называемая энтропией, изменение которой связано с поглощаемой теплотой и температурой системы уравнением:

(запрет существования в.д. второго рода) Вечный двигатель второго рода (единожды запущен, превращает в работу все получаемое тепло) не существует

Производство энтропии называют еще некомпенсированной теплотой

В закрытой системе (только теплообмен с внешней средой, нет массообмена)

Первое слагаемое отвечает за теплообмен с внешней средой. Второе – производство энтропии – за теплоту, которая потребляется в необратимом процессе (>0). В обратимом процессе она равна нулю.

Для решения задания 1 необходимо сначала посчитать по полиному NASA энтальпию образования каждого из веществ, воспользовавшись коэффициентами БД указанной в задании. Далее по следствию из закона Гесса необходимо рассчитать тепловой эффект реакции. Для составления графика, описанную выше операцию необходимо проделать в цикле по указанному диапазону температуры.

Для решения задания 2 необходимо также воспользоваться полиномом NASA для расчета энтропии и коэффициентами из БД «Third Millennium…».

Для решения задания 3 необходимо воспользоваться квадратом Борна

**Код**

Следует приложить к отчету файл с программой. Допустимо привести код в отчете, но не скриншотом, а строго текстом.

Также в этом разделе необходимо привести все входные данные, используемые для расчета (например, справочные данные).

**Результаты расчетов**

Результат работы программы по **заданию 1:**

*Тепловой эффект реакции синтеза метанола: 11774.6093 Дж/Моль*

Теплоемкость метанола: 60.9439 Дж/(Кг\*К)

Результат работы программы по **заданию 2:**

*Изменение энтропии: 0.2452 Дж/(Моль\*К)*

Результат работы программы по **заданию 3:**

*Энтропия вещества C3H4 равна: 235.3422 Дж/(Моль\*К)*