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 № 5**

**ПО КУРСУ**

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

**Ведущий преподаватель**

**Ст. преподаватель** Скичко Е.А.

**СТУДЕНТ группы КС-20** Мелехин А.А.

**Москва**

**2024**

**Теоретическое обоснование**

**Изотерма Вант-Гоффа:**

Так как стехиометрические коэффициенты реагентов – отрицательные, то все реагенты попадают в знаменатель, а продукты реакции – в числитель.

Для реакции:

**Константа равновесия:** произведение равновесных активностей веществ-участников реакции в степенях, соответствующих стехиометрическим коэффициентам. При бесконечном времени протекания реакции устанавливается химическое равновесие. Достигнутые значения концентраций (активностей) называют равновесными:

Произведение равновесных активностей есть константа равновесия (по активностям):

**Связь стандартного изменения энергии Гиббса реакции и константы равновесия:** в состоянии равновесия изобарно-изотермический потенциал (энергия Гиббса) равен 0, следовательно,

**Константа равновесия связана со стандартным значением изменения энергии Гиббса:**

**Определение направления протекания реакции**

Перепишем изотерму Вант-Гоффа в виде:

Является критерием направленности реакции.

Если , то есть произведение текущих активностей больше равновесного – то, , и протекает обратная реакция для которой .

Если , то , и протекает прямая реакция.

не является критерием направленности реакции.

**Различные виды константы равновесия**

Для реальных газов – фугитивности вместо давлений:

Экспериментально для газов удобно определять:

Для идеальных газов:

Используя определение парциального мольного давления, имеем:

,

Где - изменение числа молей веществ в ходе реакции, или разность стехиометрических коэффициентов. Для идеального раствора:

При этом для идеального раствора: ,

**Принцип Ле-Шателье:** если на систему, находящуюся в состоянии равновесия, оказать внешнее воздействие, то равновесие сместится в сторону уменьшения эффекта внешнего воздействия.

**1.** Повышение давления сдвигает равновесие в сторону уменьшения количества молекул (объема) газа.

**2.** Добавление реагента реакции сдвигает равновесие в сторону уменьшения количества этого компонента (в сторону продуктов).

**3.** Повышение (или понижение) температуры сдвигает равновесие в направление реакции, протекающей с поглощением (выделением) теплоты.

**Влияние температуры на константу равновесия.** В эндотермических реакциях константа равновесия растет с ростом температуры. В экзотермических реакциях константа равновесия снижается с ростом температуры.

Подставив конкретный вид энтальпии от температуры в уравнение и взяв, например, аналитически интеграл, получаем константу равновесия при заданной температуре.

**Расчет константы равновесия**

**1** Через стандартное значение изменения энергии Гиббса реакции ,

Которая вычислена, например, как:

**2** Через константы реакций образования всех веществ участников реакции (применив следствие закона Гесса):

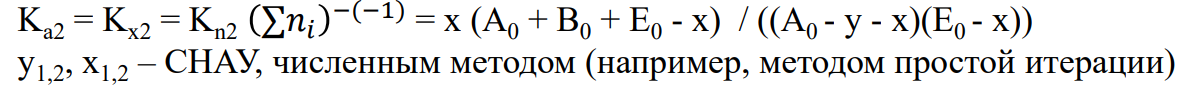
**Расчет равновесного состава смеси по константе равновесия**

**1** Может быть дана константа равновесия или изменение энергии Гиббса реакции:

**2** Решают уравнение для равновесных концентраций веществ, входящих в состав константы равновесия:

Реакция в жидкой фазе: Начальные концентрации: В состоянии равновесия: прореагировало y моль.

Обычно только один из корней (y) будет положительным и не превышающим (то есть, будет иметь физический смысл) Конверсия вещества есть его доля, прореагировавшая в ходе реакции, выраженная в процентах:



# **Задание**

**Задание 1:** Применяя принцип Ле-Шателье и уравнения (1) – (4):

**1**

**2**

**3**

**4**

где – число моль инертного газа, определите, как будет меняться равновесный выход конечных продуктов реакции при:

а) повышении температуры;

б) повышении давления;

в) добавлении инертного газа.

Исследуемая реакция:

**Задача 2**

В закрытой системе происходит реакция

A = B = C = - D =

=3 \* 10-4 = 1 \* 10-4  = - = 1.5 \* 10-4

Рассчитайте:

1. ΔG0(T) по полиномам NASA
2. мольные доли веществ в начале реакции
3. константу равновесия Ka
4. равновесные концентрации всех веществ в системе
5. равновесную степень превращения вещества A

**Код (Программа main.py)**

# Вариант 14

from cmath import log, exp

from numpy import real

def H0(a):

    global t

    global R

    return (a[0] + a[1]/2 \* t + a[2]/3 \* pow(t, 2) + a[3]/4 \* pow(t, 3) + a[4]/5 \* pow(t,4) + a[5]/t ) \*R \* t

def G(H, S):

    global t

    return real(H - (t \* S))

def S(a):

    global t

    global R

    return real(R \* (a[0] \* log(t) + a[1] \* t + a[2]/2 \* pow(t,2) + a[3]/3\*pow(t,3) + a[4]/4 \* pow(t,4) + a[6]))

def n(p):

    global t

    global R

    return p \* R \* t

def main():

    global t

    global R

    t = 298.15

    R = 8.3144

    SO2 = [3.26653380E+00, 5.32379020E-03, 6.84375520E-07, -5.28100470E-09, 2.55904540E-12, -3.69081480E+04, 9.66465108E+00]

    SO3 = [2.57803850E+00, 1.45563350E-02, -9.17641730E-06, -7.92030220E-10, 1.97094730E-12, -4.89317530E+04, 1.22651384E+01]

    O2 = [3.78245636E+00, -2.99673415E-03, 9.84730200E-06, -9.68129508E-09, 3.24372836E-12, -1.06394356E+03, 3.65767573E+00]

    # задание 1

    # 2SO2+O2=2SO3

    dH = 2\*H0(SO3) - (2\*H0(SO2) + H0(O2))

    # задание 2

    # SO2 + 1/2O2 ⇄ SO3

    p\_A = 3 \* pow(10, 4)

    p\_B = 1 \* pow(10, 4)

    p\_C = 1.5 \* pow(10, 4)

    t = 900

    dS = S(SO3) - (S(SO2) + 0.5\*S(O2))

    dH =  H0(SO3) - (H0(SO2) + 0.5\*H0(O2))

    dG = G(dH, dS)

    # количество молей вещества помноженное на объем

    n\_a = n(p\_A)

    n\_b = n(p\_B)

    n\_c = n(p\_C)

    #общее количество молей в реакции

    sum\_n = n\_a + n\_b + n\_c

    #мольные доли веществ

    x\_a = n\_a / sum\_n

    x\_b = n\_b / sum\_n

    x\_c = n\_c / sum\_n

    # Расчёт равновесных концентраций веществ

    Kc = real(exp(-dG/(R \* t))) # расчёт константы равновесия

    x = 0.9999 \* pow(10, 4) # решаем уравнение относительно x: Kc = (1.5\*10^4+x)/((3\*10^4-x)\*(1\*10^4-x))

    p1 = p\_A - x

    p2 = p\_B - x

    p3 = p\_C + x

    # Расчёт равновесной степени вещества А

    A = round((x/p1)\*100, 2)

    print("Задание 1")

    print(f"Изменение энтальпии для реакции 2SO2 + O2 = 2SO3: {dH}")

    if(dH < 0):

        print("При повышении температуры равновесие будет сдвинуто в сторону продуктов")

    else:

        print("При повышении температуры равновесие будет сдвинуто в сторону реагентов")

    print("Повышение давления сдвигает равновесие системы в сторону реагентов т.к. количество молей газообразных веществ в реагентах меньше чем в продуктах")

    print("Добавление инертного газа сдвигает равновесие в сторону продуктов (т.к. добавление инертного газа влияет обратно повышению давления)")

    print("\nЗадание 2")

    print(f"dG = {dG}")

    print(f"Мольные доли веществ в начале реакции: \nSO2 = {x\_a} \nO2 = {x\_b} \nSO3 = {x\_c}")

    print(f"Константа равновесия = {Kc}")

    print(f"Равновесные концентрации веществ: \nP1 = {p1} \nP2 = {p2} \nP3 = {p3}")

    print(f"Равновесная степень превращения для вещества А (SO2): {A}")

    # print(round(((1335625000-5000\*pow(17839742779, 0.5))/66781), 4)) # x1

    # print(round(((1335625000+5000\*pow(17839742779, 0.5))/66781), 4)) # x2

if \_\_name\_\_ == "\_\_main\_\_":

    main()

**Вывод программы**

Задание 1

Изменение энтальпии для реакции 2SO2 + O2 = 2SO3: -98032.47771951015

При повышении температуры равновесие будет сдвинуто в сторону продуктов

Повышение давления сдвигает равновесие системы в сторону реагентов т.к. количество молей газообразных веществ в реагентах меньше чем в продуктах

Добавление инертного газа сдвигает равновесие в сторону продуктов (т.к. добавление инертного газа влияет обратно повышению давления)

Задание 2

dG = -14208.973343161415

Мольные доли веществ в начале реакции:

SO2 = 0.5454545454545454

O2 = 0.1818181818181818

SO3 = 0.2727272727272727

Константа равновесия = 6.678169696993824

Равновесные концентрации веществ:

P1 = 20001.0

P2 = 1.0

P3 = 24999.0

Равновесная степень превращения для вещества А (SO2): 49.99

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  |  | | |
|  |  |  |  |
| P0 | 3 \* 104 | 1 \* 104 | 1.5 \* 104 |
| K | 1 | 0.5 | 1 |
| P | 3 \* 104 - x | 1 \* 104 - x | 1.5 \* 104 + x |