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»:**

**«Определение порядка, скорости реакции. Расчет константы скорости реакции. Расчет текущих концентраций для сложных реакций»**

Ведущий преподаватель

Ст. преподаватель Скичко Е.А.

**СТУДЕНТ группы КС-20** Мелехин А.А.

**Москва**

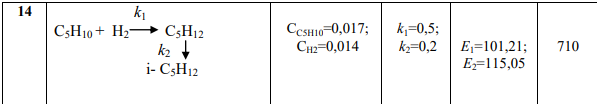
**2024**

# **Задание**

**Задание 1:** дана зависимость общего давления идеальной газовой смеси от времени при постоянной температуре в закрытом реакторе в ходе реакции . По приведённым данным рассчитайте парциальное давление и концентрацию реагента в соответствующие моменты времени, постройте кинетическую кривую концентрации реагента. Графическим методом определите константу скорости и порядок реакции *.* Рассчитайте время полупревращения исходного вещества, а также его концентрацию и степень превращения в момент времени *t1* после начала реакции. В момент начала опыта в системе присутствовал только исходный реагент.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Вариант 14 |  | | |
| *T, K* | *t, с* | *p, кПА* |  |
| 835 | 0 | 43.2 | 500 |
| 80 | 53.0 |
| 160 | 61.6 |
| 240 | 69.3 |
| 420 | 83.6 |
| 500 | 88.8 |
| 600 | 94.5 |

**Задание 2:** Построить кинетические кривые изменения концентрации всех участников реакции до достижения стационарного состояния при изотермическом протекании реакции в закрытой емкости.



**Теоретическое обоснование решения**

**Химическая кинетика** — раздел физической химии, в котором изучаются закономерности протекания во времени химических реакций и их механизм.

Разделы: **формальная кинетика** (изучаются зависимости скорости реакции от концентрации веществ, температуры, внешней среды, наличия излучения и других факторов), **химическая физика** (вычисление кинетических констант и параметров статистическими, квантовыми и другими методами), **макрокинетика** (описание кинетики совместно с учетом тепловых процессов и массопередачи), **микрокинетика** (изучение механизма сложных реакций). Термодинамика: важнейшие величины K T. **Кинетика** показывает развитие процесса во времени, определяет скорость - то, что за рамками термодинамики.

**Элементарная реакция** – реакция, для которой нет интермедиатов (или они не обнаружены и их наличия не требует теория). Элементарная реакция протекает в одну стадию и проходит ровно через одно переходное состояние. Современные представления – теория активированного комплекса. Время жизни комплекса , за такой промежуток времени происходит элементарный акт реакции.

Последовательность элементарных реакций, входящих в состав одной наблюдаемой (брутто-) реакции, называют **механизмом реакции**.

Механизм химической реакции условно записывают в виде **кинетической схемы** – последовательности стадий, где участвующие вещества обозначены словами или знаками.

**Кинетическая модель** – это математическая модель, позволяющая рассчитать скорости химических реакций и изменение концентраций, участвующих в них веществ. В общем случае для закрытой системы – система дифференциальных уравнений.

**Молекулярность** – число молекул, участвующих в элементарном акте реакции. HBr + HBr → H2 + Br2 бимолекулярная Трехмолекулярные реакции (три частицы одновременно столкнулись) уже редки, а четырехмолекулярные – не вероятны.

Классификация химических реакций:

1. В зависимости от числа элементарных стадий: простые (одностадийные), сложные (многостадийные). Особо выделяют несколько типов сложных реакций:

• обратимые A ⇄ B;

• последовательные: A → B → C;

• параллельные: 𝐴 → 𝐵, 𝐴 → С

1. По обратимости:

• кинетически необратимые,

• кинетически обратимые.

1. В зависимости от места протекания реакции:

• гомогенная – реакция происходит в объеме фазы.

• гетерогенная – реакция происходит на поверхности раздела фаз.

1. Каталитические и некаталитические.

**Закон д.м. Гульдберга-Вааге**: скорость реакции в каждый момент времени пропорциональна произведению концентраций реагирующих веществ, возведенных в некоторые степени.

В случае реальной смеси, вместо концентраций ставятся активности.

k – константа скорости, – концентрация, – частный порядок реакции по реагенту, равен стехиом. коэфф. для элементарных реакций. = 𝑛 – общий кинетический порядок реакции, равен молекулярности для элементарных (простых, и отдельных стадий сложных) реакций.

Кинетика реакций в закрытых системах. Кинетика простых необратимых реакций 1 порядка

Кинетическое уравнение в дифференциальной форме:

Кинетическое уравнение в интегральной форме:

Линейная анаморфоза , где 𝑡𝑔𝛼 = 𝑘. Размерность 𝑘 обратна скорости, обычно .

Найдем время полупревращения, то есть, время, за которое превратится половина исходного количества реагента: , поэтому

Обозначим сколько A прореагировало как . Для реакции , очевидно, : , отсюда

**Код (программа main.py)**

import matplotlib.pyplot as plt

c\_a = [0.017]

c\_b = [0.014]

c\_c = [0]

c\_d = [0]

t = [0]

dt = 0.01

n = 400

k1 = 0.5

k2 = 0.2

for i in range(1, n):

    c\_a.append(c\_a[i-1] + t[i-1] \* (-(k1\*c\_a[i-1]\*c\_b[i-1])))

    c\_b.append(c\_b[i-1] + t[i-1] \*(-(k1\*c\_a[i-1]\*c\_b[i-1])))

    c\_c.append(c\_c[i-1] + t[i-1] \*((k1\*c\_a[i-1]\*c\_b[i-1])-(k2\*c\_c[i-1])))

    c\_d.append(c\_d[i-1] + t[i-1] \*(k2\*c\_c[i-1]))

    t.append(t[i-1] + dt)

plt.figure()

plt.plot(t, c\_a, label='c(C5H10)', color='blue')

plt.plot(t, c\_b, label='c(H2)', color='red')

plt.plot(t, c\_c, label='c(C5H12)', color='green')

plt.plot(t, c\_d, label='c(i-C5H12)', color='yellow')

plt.title('Зависимость концентрации веществ от времени')

plt.ylabel('Концентрация C')

plt.xlabel('Время t')

plt.legend()

plt.grid(True)

plt.show()

**Результаты расчетов**

**Задание 1:** Расчет парциального давления и концентрации реагента в соответствующие моменты времени:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | CH3OCH3 | CH4 | H2 | CO |
| было | 43200 | - | - | - |
| ушло | 0,5x | 0,5x | 0,5x | 0,5x |
| t | p0-x | px | px | px |

Исходя из закона Дальтона:

Следовательно,

Тогда можно найти:

Формула для концентрации реагента:

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| t | P | Pa | Ca | LN(Ca) | 1/Ca |
| 0 | 43200 | 43200 | 6,222521 | 1,828175 | 0,160707 |
| 80 | 53000 | 38300 | 5,516726 | 1,707784 | 0,181267 |
| 160 | 61600 | 34000 | 4,897354 | 1,588695 | 0,204192 |
| 240 | 69300 | 30150 | 4,342801 | 1,46852 | 0,230266 |
| 420 | 83600 | 23000 | 3,312916 | 1,197829 | 0,301849 |
| 500 | 88800 | 20400 | 2,938413 | 1,07787 | 0,34032 |
| 600 | 94500 | 17550 | 2,527899 | 0,927389 | 0,395585 |

Посмотрев на графики, можно увидеть, что наиболее прямым является график *ln(C)*, из чего следует, что данная реакция является реакцией **Второго порядка**. Формула для построения графика линейной анаморфозы: y = -0,0015x + 1,8282

. Из данной формулы следует, что **константа скорости k = 0.0015** .

Построим кинетическую кривую концентрации реагента:

Расчет времени полупревращения исходного вещества:

Расчет концентрации и степени превращения в момент времени *t1* =210с.

**Задание 2:** для решения задания 2 составим систему:

A + B -> C -> D

R1 = k1 \* C(A) \* C(B)

R2 = k2 \* C(C)

Затем выведем итерационные формулы для расчета зависимости концентрация от времени для действующих компонентов реакции:

Далее, применяя программу main.py, выведем график искомых кинетических кривых.

