**Лабораторная работа 7 по ЦМФХС. Моделирование реакций в закрытой системе.**

Работа состоит из **двух заданий** и выполняется с написанием компьютерных программ на любом языке.

**Задание 1.**

***Пример решения задачи см. стр. 122-124 сборник РХТУ***

Варианты 1-22 – Дана зависимость общего давления идеальной газовой смеси от времени при постоянной температуре в закрытом реакторе в ходе реакции A (табл. 4.3, стр. 129-131 **сборник РХТУ** [Сборник задач по физической химии. Электрохимия, химическая кинетика: учебное пособие / В. Ю. Конюхов, А. В. Гребенник, А. Ю. Крюков, О. И. Воробьева. –М. : РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2021. – 224 с.]). 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 А*.* 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 (в варианте 8 – только исходные реагенты в мольном соотношении 1:1).

Вариант 23 [Кудряшов, Каретников]

Определите порядок и константу скорости реакции

CH3COOC2H5 + NaOH = CH3COONa + C2H5OH

при 291,2 K по данным эксперимента. Рассчитайте время полупревращения исходного вещества в данном опыте, а также его концентрацию и степень превращения в момент времени 2600 с после начала реакции.

|  |  |
| --- | --- |
| t, с | C(CH3COOC2H5), моль/л |
| 0 | 0,00980 |
| 178 | 0,00892 |
| 273 | 0,00864 |
| 531 | 0,00792 |
| 866 | 0,00724 |
| 1510 | 0,00646 |
| 1918 | 0,00603 |
| 2401 | 0,00574 |

Вариант 24 [Кудряшов, Каретников]

Определите порядок и константу скорости реакции

CH3COOC2H5 + NaOH = CH3COONa + C2H5OH

при 293,7 K по данным эксперимента. Рассчитайте время полупревращения исходного вещества в данном опыте, а также его концентрацию и степень превращения в момент времени 8300 с после начала реакции.

|  |  |
| --- | --- |
| t, с | C(CH3COOC2H5), моль/л |
| 0 | 0,0200 |
| 300 | 0,0128 |
| 900 | 0,00766 |
| 1380 | 0,00540 |
| 2100 | 0,00422 |
| 3300 | 0,00289 |
| 7200 | 0,00138 |

Вариант 25 [Кудряшов, Каретников]

Определите порядок и константу скорости реакции

N2O5 = N2O4 + 0,5 O2

при 298,2 K по данным эксперимента. Рассчитайте время полупревращения исходного вещества в данном опыте, а также его концентрацию и степень превращения в момент времени 4000 с после начала реакции.

|  |  |
| --- | --- |
| t, с | C(CH3COOC2H5), моль/л |
| 0 | 2,33 |
| 184 | 2,08 |
| 319 | 1,91 |
| 526 | 1,67 |
| 867 | 1,36 |
| 1198 | 1,11 |
| 1877 | 0,72 |
| 2315 | 0,55 |
| 3144 | 0,34 |

**Задание 2.**

Варианты 1-16 – уравнения реакций и кинетические параметры см. в таблице с. 97-99 **сборник ТПУ** – [Математическое моделирование химико-технологических процессов: учебное пособие/ А.В. Кравцов, Н.В. Ушева, Е.А. Кузьменко, А.Ф. Федоров; Томский политехнический университет. – 4-е изд. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2013. – 136 с].

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

Вариант 17

В системе протекает реформинг метана

CH4 + 2O2 = CO2 + 2H2O (1)

CH4 + H2O = CO + 3H2 (2)

2CO + O2 = 2CO2 (3)

2H2 + O2 = 2H2O (4)

Смесь подчиняется закону идеального газа, давление постоянно 101325 Па, температура постоянна 700 K. Начальные мольные доли веществ:

|  |  |
| --- | --- |
| Вещество | x |
| O2 | 0,2 |
| CH4 | 0,8 |

Кинетические параметры прямых (+) и обратных (-) реакций приведены в таблице.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Реакция | A, 1/с | E, кДж/моль |
| 1+ | 1e03 | 20 |
| 2+ | 2e02 | 64 |
| 2- | 1e01 | 143 |
| 3+ | 1e01 | 45 |
| 4+ | 1e03 | 45 |

Остальные стадии идут с очень малой скоростью, и ими можно пренебречь.

Задание: Получить кинетические кривые, отражающие изменение концентрации метана, воды и CO от начального момента до полного протекания реакции.

Вариант 18.

В системе протекает реформинг метана

2CH4 + O2 = 2CO + 4H2 (1)

CH4 + H2O = CO + 3H2 (2)

2CO + O2 = 2CO2 (3)

2H2 + O2 = 2H2O (4)

Смесь подчиняется закону идеального газа, давление постоянно 101325 Па, температура постоянна 700 K. Начальные мольные доли веществ:

|  |  |
| --- | --- |
| Вещество | x |
| O2 | 0,2 |
| CH4 | 0,8 |

Кинетические параметры прямых (+) и обратных (-) реакций приведены в таблице.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Реакция | A, 1/с | E, кДж/моль |
| 1+ | 1e03 | 43 |
| 2+ | 2e02 | 64 |
| 2- | 1e01 | 143 |
| 3+ | 1e01 | 45 |
| 4+ | 1e03 | 45 |

Остальные стадии идут с очень малой скоростью, и ими можно пренебречь.

Задание: Получить кинетические кривые, отражающие изменение концентрации метана, воды и CO от начального момента до полного протекания реакции.

Вариант 19.

В системе протекает реформинг метана

2CH4 + O2 = 2CO + 4H2 (1)

CH4 + H2O = CO + 3H2 (2)

2CO + O2 = 2CO2 (3)

Смесь подчиняется закону идеального газа, давление постоянно 101325 Па, температура постоянна 700 K. Начальные мольные доли веществ:

|  |  |
| --- | --- |
| Вещество | x |
| O2 | 0,1 |
| CH4 | 0,6 |
| H2O | 0,3 |

Кинетические параметры прямых (+) и обратных (-) реакций приведены в таблице.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Реакция | A, 1/с | E, кДж/моль |
| 1+ | 1e03 | 43 |
| 2+ | 4e02 | 74 |
| 2- | 2e01 | 133 |
| 3+ | 1e01 | 50 |

Остальные обратные реакции идут с очень малой скоростью, и ими можно пренебречь.

Задание: Получить кинетические кривые, отражающие изменение концентрации метана, H2 и CO от начального момента до полного протекания реакции.

Вариант 20.

В системе протекает углекислотная конверсия метана

CH4 + CO2 = 2CO + 2H2 (1)

CO + H2O = CO2 + H2 (2)

Смесь подчиняется закону идеального газа, давление постоянно 101325 Па, температура постоянна 900 K. Начальные мольные проценты веществ:

|  |  |
| --- | --- |
| Вещество | x, % |
| CH4 | 10 |
| CO2 | 15 |
| N2 | 75 |

Кинетические параметры прямых (+) и обратных (-) реакций приведены в таблице.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Реакция | A, 1/с | E, кДж/моль |
| 1+ | 1e05 | 96 |
| 1- | 3e05 | 131 |
| 2+ | 3e04 | 84 |
| 2- | 5e04 | 112 |

Задание: Получить кинетические кривые, отражающие изменение концентрации метана, H2 и CO от начального момента до установления равновесия.