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 № 1**

**ПО КУРСУ**

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

**«Расчет изменения энтальпии и энтропии в процессах»**

Ведущий преподаватель

Ст. преподаватель Скичко Е.А.

**СТУДЕНТ группы КС-26** Золотухин А.А.

**Москва**

**2024**

# Задание

1. Постройте график зависимости теплового эффекта реакции в диапазоне температур 500 K – 1000 K от температуры с использованием данных БД «Third Millennium…».
2. Рассчитайте с помощью полиномов NASA энтропию при 250 K

для вещества .

1. Определите при смешивании идеального газа A и идеального газа B; . Начальное давление газов равно 101325 Па. Конечный объем смеси . Газ A = , газ B = ,

Теоретическое обоснование решения

По закону Гесса: тепловым эффектом называется выделяемое или поглощаемое количество теплоты, зависящее только от вида и состояния исходных веществ и продуктов, если процесс протекает термодинамически необратимо при постоянном давлении или постоянном объеме без выполнения полезной работы, а продукты имеют ту же температуру.

В условиях постоянства давления тепловой эффект () равен изменению энтальпии. Поскольку принято использовать стандартные теплоты образования и вычислять стандартные тепловые эффекты реакций, то:

,

где - стандартное изменение энтальпии образования, Дж/моль,

- стандартный тепловой эффект при постоянном давлении, Дж.

Отсюда, стандартной энтальпией образования называют тепловой эффект реакции одного моля вещества из простых веществ, его составляющих, находящихся в устойчивых стандартных состояниях.

Есть реакция:

По следствию из закона Гесса:

(при заданной температуре и давлении в 1 бар),

где - стандартный тепловой эффект реакции, Дж/моль,

- стехиометрический коэффициент j - го вещества,

- стандартная энтальпия образования j - го продукта реакции, Дж/моль,

- стехиометрический коэффициент i - го вещества,

- стандартная энтальпия образования i - го исходного вещества, Дж/моль.

Исходя из следствия закона Гесса, тепловой эффект этой реакции есть стандартная теплота образования этана () за вычетом суммы стандартных энтальпий образования этилена () и водорода () с учетом стехиометрических коэффициентов:

Поскольку стандартная энтальпия образования простого вещества в основном стандартном состоянии принимается равной нулю. Поэтому:

Для нахождения каждой стандартной энтальпии образования используем полином NASA, которые имеет форму:

,

где - стандартная энтальпия образования, Дж/моль,

- универсальная газовая постоянная, 8,31 Дж/моль/К,

- термодинамическая температура, K,  
 , , …, - коэффициенты полинома.

Так как температурный диапазон в варианте 500-1000К, использую 7 вторых коэффициентов из базы данных для низкотемпературного диапазона.

Для второго задания понадобится такая форма полинома NASA, которая отвечает за нахождение стандартной энтропии:

,

где - стандартная энтропия, Дж/моль/К,

- универсальная газовая постоянная, 8,31 Дж/моль/К,

- термодинамическая температура, K,  
 , , …, - коэффициенты полинома.

Так как задана для вещества температура T = 250K, использую 7 вторых коэффициентов из базы данных для низкотемпературного диапазона.

Для третьего задания представим, что в двух сосудах, разделенных невесомой перегородкой и помещенных в термостат, находятся два не взаимодействующих идеальных газа (присвоим им индексы A и B).

Изменение энтропии при смешивании можно представить как сумму двух процессов изотермического расширения:

,

где - изменение энтропии при смешивании, Дж/К,

- изменение энтропии вещества A, Дж/К,

- изменение энтропии вещества B, Дж/К,

- количества вещества A, моль,

- универсальная газовая постоянная, 8,31 Дж/моль/К,

- объем сосуда A, ,

- объем сосуда B, .

Поскольку из уравнения состояния идеального газа:

где - давление, Па,

, , - объем сосуда, объем сосуда A, объем сосуда B соответственно, ,

- количества вещества, количество вещества A, количество вещества B соответственно, моль,

- универсальная газовая постоянная, 8,31 Дж/моль/К,

- термодинамическая температура,

- мольная доля газа A и мольная доля газа B соответственно,

то можно записать в удобной форме уравнение изменения энтропии:

.

Код

**#include** <iostream> *// для вывода*

**#include** <math.h> *// для использования натурального логарифма и возведения числа в степень*

**#include** <fstream> *// для вывода в файл*

**using** **namespace** std;

*// defining constant*

**#define** R 8.31 *// универсальная газовая постоянная*

**#define** RANGE 11 *// количество рассматриваемых температур (задание 1)*

**#define** NUM\_COEF1 6 *// количество коэффициентов (задание 1)*

**#define** NUM\_COEF2 7 *// количество коэффициентов (задание 2)*

**#define** P 101325 *// нормальное давление (задание 2\_2)*

**#define** TEMP 298 *// температура (задание 2\_2)*

**#define** V\_A 2 *// объём первого вещества (задание 2\_2)*

**#define** V\_B 3 *// объём второго вещества (задание 2\_2)*

*// defining of temperature limits*

**enum** Temp { T1 **=** 500, T2 **=** 1000};

*// defining of coefficients*

**constexpr** **double** a\_C2H4[NUM\_COEF1] **=** {3.952920063**E**00, **-**7.57051373**E-**03, 5.70989993**E-**05, **-**6.91588352**E-**08, 2.69884190**E-**11, 5.08977598**E+**03};

**constexpr** **double** a\_C2H6[NUM\_COEF1] **=** {4.29142572**E+**00, **-**5.50154901**E-**03, 5.99438458**E-**05, **-**7.08466469**E-**08, 2.68685836**E-**11, **-**1.15222056**E+**04};

**constexpr** **double** a\_C2H6S[NUM\_COEF2] **=** {0.19139966**E+**01, 0.29420442**E-**01, **-**0.24128528**E-**04, 0.15495718**E-**07, **-**0.50061422**E-**11, **-**0.62072425**E+**04, 0.15648303**E+**02};

**void** enthalpy(**int** [], **const** **double** [], **double** []);

**double** entropia(**const** **double** []);

**double** entropia\_mix();

**int** main() {

*// объявление массива температур*

**int** T[RANGE] **=** {T1};

**for** (**int** i **=** 0; i **<** RANGE; i**++**) {

T[i **+** 1] **=** T[i] **+** (T2 **-** T1) **/** (RANGE **-** 1);

}

*// объявление стандартных энтальпий образований веществ*

**double** H\_C2H4[RANGE] **=** {0};

**double** H\_H2;

**double** H\_C2H6[RANGE] **=** {0};

enthalpy(T, a\_C2H4, H\_C2H4);

H\_H2 **=** 0.0;

enthalpy(T, a\_C2H6, H\_C2H6);

*// поиск стандартного теплового эффекта*

**double** H[RANGE] **=** {0};

**for**(**int** i **=** 0; i **<** RANGE; i**++**) {

H[i] **=** H\_C2H6[i] **-** H\_H2 **-** H\_C2H4[i];

}

printf("Task\_1:\n");

**for**(**int** i **=** 0; i **<** RANGE; i**++**) {

printf("\tdH = %.2lf kJ/m (T = %d K)\n", H[i] **/** 1000, T[i]);

}

*// вывод в файл для отображения на графике*

ofstream task\_1 ("task\_1.txt");

**if** (task\_1.is\_open()) {

**for** (**int** i **=** 0; i **<** RANGE; i**++**)

task\_1 **<<** T[i] **<<** " " **<<** H[i]**/**1000 **<<** "\n";

task\_1.close();

}

**else** cout **<<** "Unable to open file";

*// поиск энтропии вещества*

**double** S **=** entropia(a\_C2H6S);

*// поиск энтропии при смешивании двух веществ*

**double** dS\_mix **=** entropia\_mix();

printf("Task\_2\_1:\n\tS = %.5lf J/m/K\nTask\_2\_2:\n\tS\_mix = %.5lf J/K\n", S, dS\_mix);

**return** 0;

}

*// функция для поиска стандартной энтальпии образования вещества с помощью полинома NASA*

**void** enthalpy(**int** *T*[], **const** **double** *a*[], **double** *DH*[]) {

**for** (**int** i **=** 0; i **<** RANGE; i**++**) {

*DH*[i] **=** (*a*[0] **+**

*a*[1]**/**2 **\*** *T*[i] **+**

*a*[2]**/**3 **\*** pow(*T*[i], 2) **+**

*a*[3]**/**4 **\*** pow(*T*[i], 3) **+**

*a*[4]**/**5 **\*** pow(*T*[i], 4) **+**

*a*[5] **/** *T*[i]) **\*** R **\*** *T*[i];

}

}

*// функция для поиска стандартной энтропии вещества с помощью полинома NASA*

**double** entropia(**const** **double** *a*[]) {

**double** Temper **=** 250;

**return** (*a*[0] **\*** std::log(Temper) **+**

*a*[1] **\*** Temper **+**

*a*[2]**/**2 **\*** pow(Temper, 2) **+**

*a*[3]**/**3 **\*** pow(Temper, 3) **+**

*a*[4]**/**4 **\*** pow(Temper, 4) **+**

*a*[6]) **\*** R;

}

*// функция для поиска энтропии при смешивании двух веществ*

**double** entropia\_mix() {

**double** n\_a **=** P **\*** V\_A **/** (R **\*** TEMP);

**double** n\_b **=** P **\*** V\_B **/** (R **\*** TEMP);

**double** x\_a **=** n\_a **/** (n\_a **+** n\_b);

**double** x\_b **=** n\_b **/** (n\_a **+** n\_b);

**return** **-**(n\_a **+** n\_b) **\*** R **\*** (x\_a **\*** std::log(x\_a) **+** x\_b **\*** std::log(x\_b)) **\*** pow(10, **-**4);

}

Результаты расчетов

Task\_1:

dH = -133.73 kJ/m (T = 500 K)

dH = -132.92 kJ/m (T = 550 K)

dH = -132.03 kJ/m (T = 600 K)

dH = -131.07 kJ/m (T = 650 K)

dH = -130.04 kJ/m (T = 700 K)

dH = -128.93 kJ/m (T = 750 K)

dH = -127.76 kJ/m (T = 800 K)

dH = -126.52 kJ/m (T = 850 K)

dH = -125.22 kJ/m (T = 900 K)

dH = -123.87 kJ/m (T = 950 K)

dH = -122.46 kJ/m (T = 1000 K)

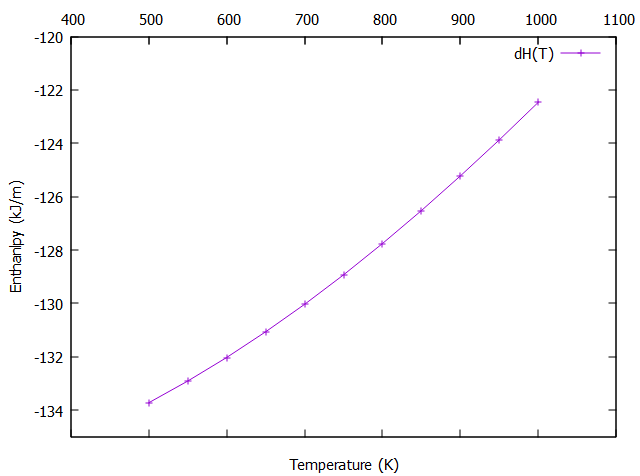


Рис. 1.

На рис. 1 показан случай, иллюстрирующий в качественной форме влияние температуры на энтальпию (тепловой эффект) химической реакции. Из графика видно, что в данной реакции при увеличении температуры увеличивается и показатель теплового эффекта заданной химической реакции.

Взяв какую-нибудь фиксированную температуру из диапазона вариантов, (например, при ) наша реакция приходит к виду:

что означает

Task\_2:

S = 273.34309 J/m/K.

Task\_2\_2:

S\_mix = 0.11442 J/K.