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»:**

**«Расчет константы равновесия, равновесных концентраций»**

Ведущий преподаватель

Ст. преподаватель Скичко Е.А.

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

**Москва**

**2024**

# Задание

1. Применяя принцип Ле-Шателье и уравнения (1)-(4),

|  |  |
| --- | --- |

|  |  |
| --- | --- |

|  |  |
| --- | --- |

|  |  |
| --- | --- |

,

определите, как будет меняться равновесный выход конечных продуктов реакции при:

а) повышении температуры;

б) повышении давления;

в) добавлении инертного газа;

1. В закрытой системе происходит реакция

| № варианта | Реакция | A | B | C | D | p\*104, Па | | | | T, K |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| A | B | C | D |
| 7 |  |  |  | - |  | 20 | 20 | - | 10 | 800 |

Рассчитайте:

1. по полиномам NASA;
2. мольные доли веществ в начале реакции;
3. константу равновесия ;
4. Равновесные концентрации всех веществ в системе;
5. равновесную степень превращения вещества A;

Теоретическое обоснование решения

Есть реакция:

|  |  |
| --- | --- |

Чтобы определить, как будет меняться равновесный выход конечных продуктов реакции при внешнем воздействии, можно воспользоваться **принципом Ле-Шателье**: если на систему, находящуюся в состоянии равновесия, оказывать внешнее воздействие, то равновесие в системе изменяется так, чтобы эффект воздействия был минимальным.

**Первое начало термодинамики** гласит: в условиях постоянства кинетической и потенциальной энергий системы теплота (Q, Дж), поглощенная системой, расходуется на увеличение внутренней энергии (U, Дж) и совершение системой работы (W, Дж):

| . |  |
| --- | --- |

**Второе начало термодинамики** гласит: существует некоторая экстенсивная функция состояния, называемая энтропией (S, Дж/К), изменение которой связано с поглощаемой системой теплотой (Q, Дж) и температурой (T, K) в соответствии с уравнением:

|  |  |
| --- | --- |

Объединяя первое и второе начало термодинамики и учитывая, что *Q* и *W* - функции пути, а *U* - функция состояния, а также равновесный, обратимый процесс, получаем:

|  |  |
| --- | --- |

или, если в системе совершается работа только против сил внешнего давления, то

|  |  |
| --- | --- |

где *p -* давление газа, Па,

*V* - объем газа, м3.

Прибавим к обеим частям равенства *(2) Vdp*:

|  |  |
| --- | --- |

Т.к. - свойство полного дифференциала:

|  |  |
| --- | --- |

или по свойству полного дифференциала *du + dv = d(u + v)*:

| . |  |
| --- | --- |

Величина является полным дифференциалом термодинамической функции , называемой **энтальпией**. Уравнение *(3)* можно переписать:

|  |  |
| --- | --- |

Можно заметить, что энтропия *S* и давление *p* для энтропии являются **естественными** переменными, т.е.

Прибавим к обеим частям равенства *(2) Vdp - SdT*:

|  |  |
| --- | --- |

или

|  |  |
| --- | --- |

Т.к. и - свойство полного дифференциала:

|  |  |
| --- | --- |

или по свойству полного дифференциала *du + dv = d(u + v)*:

| . |  |
| --- | --- |

Из *(2)* я показал, что *U + pV* есть энтальпия. Тогда *(4)*:

|  |  |
| --- | --- |

Гиббс показал, что поведение закрытых термодинамических систем при постоянном давлении описывается функцией состояния *G* (**энергией Гиббса**):

|  |  |
| --- | --- |

где - энтальпия,

*S* - энтропия.

Заменив *(H - TS)* на *G*, равенство *(5)* можно записать:

|  |  |
| --- | --- |

Представим полный дифференциал в частных производных по независимым переменным *p, T:*

| . |  |
| --- | --- |

Рассматривая уравнения *(7)* и *(8)*, можно заметить, что:

| . |  |
| --- | --- |

Знак минус в *(9)* означает, что с увеличением температуры энергия Гиббса уменьшается, поскольку энтропия всегда положительная. Из *(6)* можно выразить энтропию и подставить в *(9)*:

| . |  |
| --- | --- |

Возьмем производную от *G/T* по *T:*

| . |  |
| --- | --- |

Т.к. :

| . |  |
| --- | --- |

Подставляя *(9)* в *(10)*:

| , |  |
| --- | --- |

а величина *(ST+G)* является из *(6)* энтальпией, тогда

| , |  |
| --- | --- |

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.

Для изменения энергии Гиббса в каком-либо процессе уравнение *(11)* приобретает вид:

| , |  |
| --- | --- |

где - изменение энергии Гиббса для реакции, проводимой при температуре T при условии, что все реагенты и продукты находятся в стандартном состоянии.

- тепловой эффект реакции, проводимой при постоянстве давления, при температуре T и условии, что все реагенты и продукты реакции находятся в стандартном состоянии.

Уравнение *(12)* называется **уравнением Гиббса**.

При *p,T - const* выразим энергию Гиббса для химической реакции *(1)* ( через разность сумм химических потенциалов продуктов реакции () и исходных веществ () с учетом стехиометрических коэффициентов (, ):

| . |  |
| --- | --- |

Поскольку для любого идеального газа , то *(13)*:

|  |  |
| --- | --- |

где - стандартный химический потенциал i-ого (CO, Cl2, COCl2) компонента

pi - парциальное давление i-ого компонента в исходной газовой смеси.

Перегруппируем и получим:

|  |  |
| --- | --- |

Обозначив как стандартное изменение энергии Гиббса , получим:

| . |  |
| --- | --- |

В состоянии равновесия **химическое сродство** должно быть равно нулю, поэтому *(14)*:

|  |  |
| --- | --- |

и, следовательно,

|  |  |
| --- | --- |

и, можно заметить, что величина под знаком натурального логарифма есть характеристика равновесного состояния - **константа равновесия**

|  |  |
| --- | --- |

Подставим *(15)* в *(12)* и получим:

|  |  |
| --- | --- |

которое является уравнением **изобары Вант-Гоффа**. Оно показывает, что в случае эндотермических реакций, когда , константа равновесия возрастает с повышением температуры, а в экзотермических () , наоборот, уменьшается.

Для расчета воспользуемся **следствием 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 сумма стандартных теплот образования монооксида углерода () и хлора () за вычетом стандартной энтальпии образования фосгена () с учетом стехиометрических коэффициентов:

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 до 1000К, использую 7 вторых коэффициентов из базы данных для низкотемпературного диапазона.

Согласно **закону Дальтона**: парциальное давление компонента газовой смеси (pi, Па) равно произведению его мольной доли () на общее давление (p, Па):

|  |  |
| --- | --- |

где равна отношению числа моль данного компонента (ni, моль) смеси к общему числу моль всех (k) компонентов газового раствора:

|  |  |
| --- | --- |

Исходя из того, что и *(16)*, можно получить:

|  |  |
| --- | --- |

используя *(17)*, преобразуем:

|  |  |
| --- | --- |

где - разность между стехиометрическими коэффициентами у продуктов реакции и исходных веществ, т.е. .

Из *(18)* видно, что Kp не зависит от давления, а значит, при фиксированной температуре, можно рассмотреть , а именно: когда , увеличение давления должно приводить к уменьшению дроби с количествами вещества, и, следовательно, уменьшению равновесного выхода, если же , то воздействие будет обратным.

В общем случае, когда в смеси есть и инертные газы, которые не принимают участие в реакции, выражение *(18)* примет вид:

|  |  |
| --- | --- |

где, nин. газ - число моль инертных газов.

Из *(19)* видно, что присутствие инертного газа оказывает воздействие, аналогичное уменьшению давления (разбавление смеси), и, следовательно, анализ этого случая аналогичен рассмотренному выше.

Есть реакция:

|  |  |
| --- | --- |

Для второго задания понадобится также 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 температура T = 800K, использую 7 вторых коэффициентов из базы данных для низкотемпературного диапазона.

Из формулы *(6)* очевидно, что стандартное изменение гиббса в ходе химической реакции можно найти через уравнение:

| , |  |
| --- | --- |

или, учитывая следствие из закона Гесса и реакцию *(20)*:

|  |  |
| --- | --- |

Для поиска мольных долей веществ в начале реакции воспользуемся *(16)* и **законом Дальтона**: давление смеси идеальных газов (p, Па) равно сумме парциальных давлений (pi, Па), входящих в нее газов (n):

| . |  |
| --- | --- |

Получаем мольные доли веществ в начале реакции:

;

;

.

Константу равновесия Ka можно рассчитать, пользуясь уравнением *(15)*:

|  |  |
| --- | --- |

где - стандартное изменение энергии Гиббса, которое можно рассчитать по формуле *(21)*.

Для расчета равновесного состава газовой смеси, буду действовать так: если исходить и из 1 моль *()*, то в равномерной смеси останется *(1 - x)* моль *()* и образуется моль *()* и моль *()*. Общее число молей в равновесной смеси газов составит: .

Равновесные парциальные давления тогда из *(16)*:

|  |  |
| --- | --- |

|  |  |
| --- | --- |

| . |  |
| --- | --- |

Зная, что , можно составить уравнение:

|  |  |
| --- | --- |

тогда *x* можно найти как .

Для расчета **равновесных концентраций** всех веществ в системе воспользуемся **уравнением состояния идеального газа**:

| , |  |
| --- | --- |

откуда можно заметить концентрацию (), тогда *(26)* можно разложить на формулы через равновесные парциальные давления из *(23)*-*(25)*:

|  |  |
| --- | --- |

|  |  |
| --- | --- |

| . |  |
| --- | --- |

**Равновесная степень превращения** исходного вещества *N2* () - отношение количества вещества (, моль), прореагированного к моменту установления в системе равновесия, к исходному количеству этого вещества (, моль):

|  |  |
| --- | --- |

Код

**const** std = @import("std");

**const** print = std.debug.print; *// для вывода в консоль*

**const** math = std.math; *// для работы с библиотекой math*

**const** R: **f32** = 8.31; *// универсальная газовая постоянная*

**const** T1\_1: **f32** = 298.0; *// начальная температура (задание 1\_1)*

**const** T2\_1: **f32** = 300.0; *// температура повышенная (задание 1\_1)*

**const** T\_2: **f32** = 800.0; *// температура для смеси (задание 2)*

**const** p\_N\_2: **f32** = 20.0e4; *// парциальное давление азота (задание 2)*

**const** p\_H\_2: **f32** = 20.0e4; *// парциальное давление водорода (задание 2)*

**const** p\_NH\_3: **f32** = 10.0e4; *// парциальное давление аммиака (задание 2)*

**const** v\_COCl\_2: **f32** = 1.0; *// стехиометрический коэффициент фосгена (задание 1)*

**const** v\_CO: **f32** = 1.0; *// стехиометрический коэффициент монооксида (задание 1)*

**const** v\_Cl\_2: **f32** = 1.0; *// стехиометрический коэффициент хлора (задание 1)*

**const** v\_N\_2: **f32** = 1.0 **/** 2.0; *// стехиометрический коэффициент азота (задание 2)*

**const** v\_H\_2: **f32** = 3.0 **/** 2.0; *// стехиометрический коэффициент водорода (задание 2)*

**const** v\_NH\_3: **f32** = 1.0; *// стехиометрический коэффициент аммиака (задание 2)*

**const** NUM\_COEF: **i32** = 7; *// количество коэффициентов в полиноме NASA*

*// определение коэффициентов для полиномов NASA (задание 1)*

**const** a\_COCl\_2 = [NUM\_COEF]**f32**{ 1.70787910E+00, 2.89369464E-02, **-**4.93289116E-05, 4.16910139E-08, **-**1.37057391E-11, **-**2.78350932E+04, 1.76202114E+01 };

**const** a\_CO = [NUM\_COEF]**f32**{ 3.57953347E+00, **-**6.10353680E-04, 1.01681433E-06, 9.07005884E-10, **-**9.04424499E-13, **-**1.43440860E+04, 3.50840928E+00 };

**const** a\_Cl\_2 = [NUM\_COEF]**f32**{ 2.73638114E+00, 7.83525699E-03, **-**1.45104963E-05, 1.25730834E-08, **-**4.13247143E-12, **-**1.05880114E+03, 9.44557148E+00 };

*// определение коэффициентов для полиномов NASA (задание 2)*

**const** a\_N\_2 = [NUM\_COEF]**f32**{ 3.53100528E+00, **-**1.23660988E-04, **-**5.02999433E-07, 2.43530612E-09, **-**1.40881235E-12, **-**1.04697628E+03, 2.96747038E+00 };

**const** a\_H\_2 = [NUM\_COEF]**f32**{ 0.23443029E+01, 0.79804248E-02, **-**0.19477917E-04, 0.20156967E-07, **-**0.73760289E-11, **-**0.91792413E+03, 0.68300218E+00 };

**const** a\_NH\_3 = [NUM\_COEF]**f32**{ 4.46075151E+00, **-**5.68781763E-03, 2.11411484E-05, **-**2.02849980E-08, 6.89500555E-12, **-**6.70753514E+03, **-**1.34450793E+00 };

*// структура для вывода мольных долей*

**const** MolarFrac = **struct** {

title: []**const** **u8**,

meaning: **f32**,

};

**pub** **fn** main() **!void** {

print("{s}", .{"Lab: 5. Variant: 7\n"});

print("{s}", .{"Task\_1\n"});

print("{s}", .{"\tInitial chemical reaction: COCl2 -> CO + Cl2\n"});

*// объявление стандартных энтальпий образований веществ*

**var** H\_COCl\_2: **f32** = 0.0;

**var** H\_CO: **f32** = 0.0;

**var** H\_Cl\_2: **f32** = 0.0;

*// поиск стандартных энтальпий образований веществ при T = 298K*

H\_COCl\_2 = enthalpy(T1\_1, **&**a\_COCl\_2);

H\_CO = enthalpy(T1\_1, **&**a\_CO);

H\_Cl\_2 = enthalpy(T1\_1, **&**a\_Cl\_2);

**var** H: **f32** = 0.0; *// объявление стандартного теплового эффекта*

H = (H\_CO **+** H\_Cl\_2) **-** H\_COCl\_2; *// поиск стандартного теплового эффекта*

**var** K\_p: **f32** = 0.0; *// объявление константы равновесия*

K\_p = equilibrium\_constant\_VantGoff(H, T1\_1); *// поиск константы равновесия при T = 298K*

print("\tTask\_1\_1:\n\t\tdH = {any} kJ/mol (T = {any} K)\n\t\tK\_p = {any}\n", .{ H **/** 1000, T1\_1, K\_p }); *// вывод задания 1\_1*

*// поиск стандартных энтальпий образований веществ при T = 300K*

H\_COCl\_2 = enthalpy(T2\_1, **&**a\_COCl\_2);

H\_CO = enthalpy(T2\_1, **&**a\_CO);

H\_Cl\_2 = enthalpy(T2\_1, **&**a\_Cl\_2);

H = (H\_CO **+** H\_Cl\_2) **-** H\_COCl\_2; *// поиск стандартного теплового эффекта*

K\_p = equilibrium\_constant\_VantGoff(H, T2\_1); *// поиск константы равновесия при T = 300K*

print("\t\tdH = {any} kJ/mol (T = {any} K)\n\t\tK\_p = {any}\n", .{ H **/** 1000, T2\_1, K\_p }); *// вывод задания 1\_1*

**var** dv: **i32** = 0; *// объявление разности между стехиометрическими коэффициентами*

dv = (v\_CO **+** v\_Cl\_2) **-** v\_COCl\_2; *// поиск разности между стехиометрическими коэффициентами*

print("\tTask\_1\_2:\n\t\tdv = {}\n", .{dv}); *// вывод задания\_1\_2*

print("\tTask\_1\_3:\n\t\tdv = {}\n", .{dv}); *// вывод задания\_1\_3*

print("{s}", .{"Task\_2\n"});

print("{s}", .{"\tInitial chemical reaction: 1/2N2 + 3/2H2 -> NH3\n"});

*// объявление стандартных энтальпий образований веществ*

**var** H\_N\_2: **f32** = 0.0;

**var** H\_H\_2: **f32** = 0.0;

**var** H\_NH\_3: **f32** = 0.0;

*// поиск стандартных энтальпий образований веществ при T = 800K*

H\_N\_2 = enthalpy(T\_2, **&**a\_N\_2);

H\_H\_2 = enthalpy(T\_2, **&**a\_H\_2);

H\_NH\_3 = enthalpy(T\_2, **&**a\_NH\_3);

*// объявление стандартных энтропий образований веществ*

**var** S\_N\_2: **f32** = 0.0;

**var** S\_H\_2: **f32** = 0.0;

**var** S\_NH\_3: **f32** = 0.0;

*// поиск стандартных энтропий образований веществ при T = 800K*

S\_N\_2 = entropia(T\_2, **&**a\_N\_2);

S\_H\_2 = entropia(T\_2, **&**a\_H\_2);

S\_NH\_3 = entropia(T\_2, **&**a\_NH\_3);

**var** G: **f32** = 0.0; *// объявление стандартного изменения энергии Гиббса*

G = 1 **\*** H\_NH\_3 **-** (1 **/** 2 **\*** H\_N\_2 **+** 3 **/** 2 **\*** H\_H\_2) **-** T\_2 **\*** (1 **\*** S\_NH\_3 **-** (1 **/** 2 **\*** S\_N\_2 **+** 3 **/** 2 **\*** S\_H\_2)); *// поиск стандартного изменения энергии Гиббса*

print("\tTask\_2\_1:\n\t\tdG = {any} kJ/mol\n", .{G **/** 1000}); *// вывод задания\_2\_1*

*// объявление мольных долей веществ*

**var** x\_N\_2: **f32** = 0.0;

**var** x\_H\_2: **f32** = 0.0;

**var** x\_NH\_3: **f32** = 0.0;

*// поиск мольных долей веществ*

x\_N\_2 = molar\_fraction(p\_N\_2, p\_N\_2 **+** p\_H\_2 **+** p\_NH\_3);

x\_H\_2 = molar\_fraction(p\_H\_2, p\_N\_2 **+** p\_H\_2 **+** p\_NH\_3);

x\_NH\_3 = molar\_fraction(p\_NH\_3, p\_N\_2 **+** p\_H\_2 **+** p\_NH\_3);

*// вывод задания 2\_2*

print("\t{s}", .{"Task\_2\_2:\n"});

**var** alloc = std.heap.ArenaAllocator.init(std.heap.page\_allocator);

**defer** alloc.deinit();

**const** allocator = alloc.allocator();

**var** list = std.MultiArrayList(MolarFrac){};

**try** list.append(allocator, .{ .title = "X\_N\_2", .meaning = x\_N\_2 });

**try** list.append(allocator, .{ .title = "X\_H\_2", .meaning = x\_H\_2 });

**try** list.append(allocator, .{ .title = "X\_NH\_3", .meaning = x\_NH\_3 });

**for** (list.items(.title), list.items(.meaning)) **|**title, meaning**|** {

print("\t\t{s} = {any}\n", .{ title, meaning });

}

K\_p = equilibrium\_constant\_main(G, T\_2); *// поиск константы равновесия*

print("\tTask\_2\_3\n\t\tK\_a = {}\n", .{K\_p}); *// вывод задания\_2\_3*

*// вычисление корней уравнения*

**const** x\_1 = math.pow(**f32**, 4 **/** ((p\_N\_2 **+** p\_H\_2 **+** p\_NH\_3) **\*** K\_p **\*** math.pow(**f32**, 3.0, 3.0 **/** 2.0) **+** 4.0), 1.0 **/** 2.0);

**const** x\_2 = **-**math.pow(**f32**, 4 **/** ((p\_N\_2 **+** p\_H\_2 **+** p\_NH\_3) **\*** K\_p **\*** math.pow(**f32**, 3.0, 3.0 **/** 2.0) **+** 4.0), 1.0 **/** 2.0);

*// вычисление равновесных концентраций*

**const** C\_N\_2 = equilibrium\_concentration(x\_1, (p\_N\_2 **+** p\_H\_2 **+** p\_NH\_3), T\_2, v\_N\_2);

**const** C\_H\_2 = equilibrium\_concentration(x\_1, (p\_N\_2 **+** p\_H\_2 **+** p\_NH\_3), T\_2, v\_H\_2);

**const** C\_NH\_3 = equilibrium\_concentration(x\_1, (p\_N\_2 **+** p\_H\_2 **+** p\_NH\_3), T\_2, v\_NH\_3);

*print("{s}x\_1 = {}\n\t\tx\_2 = {}\n\t\tC\_N\_2 = {} mol/l\n\t\tC\_H\_2 = {} mol/l\n\t\tC\_NH\_3 = {} mol/l\n", .{ "\tTask\_2\_4\n\t\t", x\_1, x\_2, C\_N\_2, C\_H\_2, C\_NH\_3 }); // вывод задания\_2\_4*

*// вычисление равновесной степени превращения*

**const** alpha = equilibrium\_degree\_transformation(x\_1, v\_N\_2, v\_N\_2);

print("\tTask\_2\_5\n\t\talpha = {}\n", .{alpha}); *// вывод задания\_2\_5*

}

**fn** enthalpy(T: **f32**, a: **\*const** [NUM\_COEF]**f32**) **f32** {

**return** (a[0] **+**

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

a[2] **/** 3 **\*** math.pow(**f32**, T, 2) **+**

a[3] **/** 4 **\*** math.pow(**f32**, T, 3) **+**

a[4] **/** 5 **\*** math.pow(**f32**, T, 4) **+**

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

}

**fn** equilibrium\_constant\_VantGoff(H: **f32**, T: **f32**) **f32** {

**return** math.exp(H **/** (R **\*** math.pow(**f32**, T, 2)));

}

**fn** molar\_fraction(p\_i: **f32**, p\_total: **f32**) **f32** {

**return** p\_i **/** p\_total;

}

**fn** entropia(T: **f32**, a: **\*const** [NUM\_COEF]**f32**) **f32** {

**return** (a[0] **\*** math.log(**f32**, math.e, T) **+**

a[1] **\*** T **+**

a[2] **/** 2 **\*** math.pow(**f32**, T, 2) **+**

a[3] **/** 3 **\*** math.pow(**f32**, T, 3) **+**

a[4] **/** 4 **\*** math.pow(**f32**, T, 4) **+**

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

}

**fn** equilibrium\_constant\_main(G: **f32**, T: **f32**) **f32** {

**return** math.exp(**-**(G **/** (R **\*** T)));

}

**fn** equilibrium\_concentration(x: **f32**, p: **f32**, T: **f32**, v: **f32**) **f32** {

**return** v **\*** p **\*** x **/** ((1 **+** x) **\*** R **\*** T);

}

**fn** equilibrium\_degree\_transformation(x: **f32**, n: **f32**, n\_0: **f32**) **f32** {

**return** n **\*** x **/** n\_0;

}

Результаты расчетов

Lab: 5. Variant: 7

Task\_1

Initial chemical reaction: COCl2 -> CO + Cl2

Task\_1\_1:

dH = 1.089101e2 kJ/mol (T = 2.98e2 K)

K\_p = 8.627913e-1

dH = 1.0892065e2 kJ/mol (T = 3e2 K)

K\_p = 8.644729e-1

Поскольку - процесс эндотермический, сместится в сторону продуктов реакции. При увеличении температуры химическое равновесие смещается в сторону эндотермической реакции, в сторону продуктов реакции.

Task\_1\_2:

dv = 1

Поскольку , происходит уменьшение равновесного выхода. При повышении давления химическое равновесие протекает в сторону, где меньше молекул газа, в сторону реагента - фосгена.

Task\_1\_3:

dv = 1

Поскольку , происходит уменьшение равновесного выхода. При введении в смесь инертного газа химическое равновесие протекает в сторону реагента - фосгена.

Task\_2

Initial chemical reaction: 1/2N2 + 3/2H2 -> NH3

Task\_2\_1:

dG = -9.75451e1 kJ/mol

Task\_2\_2:

X\_N\_2 = 4e-1

X\_H\_2 = 4e-1

X\_NH\_3 = 2e-1

Task\_2\_3

K\_a = 2.3568742e6

Task\_2\_4

x\_1 = 8.082316e-7

x\_2 = -8.082316e-7

из двух корней выбрал положительный и тот, у которого значение меньше изначального, т.е. *x\_1*

C\_N\_2 = 3.0393761e-5 mol/l

C\_H\_2 = 9.118128e-5 mol/l

C\_NH\_3 = 6.0787523e-5 mol/l

Task\_2\_5

alpha = 8.082316e-7