**Элементарные химические реакции**

***Закон действующих масс (теория)***

Элементарной химической реакцией называется реакция, протекающая в одну стадию (без образования промежуточных веществ) при непосредственном взаимодействии молекул исходных веществ друг с другом.

В таких реакиях, как правило, образуется или разрывается не более одной-двух связей между атомами взаимодействующих молекул, например

H2 +O→H2O. (1)

Уравнения вида (1) называются *стехиометрическими*. В общем виде они записываются следующим об разом:

n1A1 +n2A2 +··· → m1X1 +m2X2+..., (2)

где Ai -реагенты, Xi - продукты реакции, ni и mi - *стехиометрические коэффициенты*, которые показывают, сколько молекул каждого вида участвует в реакции с той или другой стороны.

Число реагирующих молекул называется *молекулярностью* реакции. Для элементарных реакций эта величина также называется их *порядком* (в сложных реакциях порядок, вообще говоря, не равен молекулярности). Элементарные реакции обычно имеют первый или второй порядок, существенно реже третий. Элементарных реакций более высоких порядков не бывает в силу исчезающе малой вероятности одновременного столкновения четырех и более молекул.

*Закон действующих масс*, открытый в 1864 году норвежскими учеными Гульдбергом и Вааге, утверждает, что скорость протекания элементарной реакции (2), т. е. количество элементарных актов реакции в единицу времени, пропорциональна концентрациям реагирующих веществ в степенях, равных стехиометрическим коэффициентам:



где *a*i - концентрация молекул вида Ai, *k* - коэффициент пропорциональности (константа скорости реакции), специфичный для данной реакции и зависящий также от условий проведения реакции, например от температуры раствора.

Скорость реакции определяет скорость, с которой изменяется концентрация каждого вещества, участвующего в этой реакции:



где параметр δi показывает изменение числа молекул рассматриваемого вида в результате одного элементарного акта реакции. Например, для реакции вида

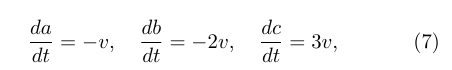
A+2B→3C (5)

скорость реакции равна



где *a* и *b* - концентрации веществ A и B соответственно. Будем придерживаться такой системы обозначений: заглавная латинская буква обозначает вещество, соответствующая ей строчная буква концентрацию этого вещества.

Тогда скорости изменения концентраций веществ A, B и C в данной реакции будут равны соответственно:



т. к. в процессе одного элементарного акта рассматриваемой реакции (5) число молекул A уменьшается на одну, поэтому δA = −1, число молекул B уменьшается на две, поэтому δB = −2, а число молекул C увеличивается на три, поэтому δC = 3.

Дифференциальные уравнения вида (7) называются *кинетическими*. Основная задача химической кинетики заключается в определении того, как для заданной системы химических реакций меняются со временем концентрации реагирующих веществ.

***Задача*** • Постройте модели для следующих элементарных химических реакций второго порядка и определите, как со временем меняются концентрации веществ.

**Вариант 2.** 2A→B

**Вариант 3.** 2A→A+B

**Вариант 4.**  A+B→C+D

**Вариант 5.** A+B→C.

**Вариант 6.** Постройте и решите кинетическое уравнение для реакции второго порядка с катализатором:

A+C→B+C. (8)

Как следует из (8), катализатор C в реакции не расходуется, т. е. c(t) ≡ c0, но влияет на ее скорость.

**Вариант 7.**  Исследуйте модель автокаталитической реакции следующего вида

A+C→C+C,

в которой катализатор реакции C является также ее продуктом.

**Вариант 8.** Постройте и проанализируйте модель обратимой каталитической реакции:

A+C→B+C,B→A, (9)

в которой константы скоростей равны k1 и k2 соответственно.

**Вариант 9.** Постройте дифференциальное уравнение для элементарной химической реакции третьего порядка

A+B+C→D (10)

с начальным условием a(0) = a0, b(0) = b0 и c(0) = c0.

Решите поставленную начальную задачу для различных значений начальных концентраций.

Примерный план выполнения задания

1. Подключите необходимые библиотеки.
2. Введите символы для переменной t, константы скорости реакции k, начальных концентраций веществ.
3. Определите функцию x(t). Функция x(t) обозначает убыль вещества a.
4. Функции a(t), b(t), c(t) и d(t) как объекты SymPy не понадобятся, т. к. будем выражать их через x(t), для чего будет достаточно обычных переменных. По этой же причине не нужно определять производную функции x(t).
5.  Вычислите скорость реакции .
6. Запишите кинетическое уравнение a’ = *k* для концентрации a(t), производную a’ при этом вычислите с помощью команды diff . Библиотека SymPy автоматически подставит вместо переменных a и v вычисленные ранее их выражения через функцию x, и в результате получим искомое дифференциальное уравнение для неизвестной функции x(t).
7. Создайте нулевое начальное условие x(0)=0 и решите соответствующую начальную задачу.
8. Подставьте в найденное параметризованное решение конкретные значения константы скорости реакции и начальных концентраций.
9. Постройте график найденного решения на интервале t∈[0,T] для значения T=5.
10. Постройте графики искомых зависимостей a(t), b(t), c(t) и d(t). Все три кривые строятся по одной и той же схеме:

- заменяем в соответствующем выражении символ x на правую часть найденного решения dsol= dsolve(…);

- заменяем там же параметры на их числовые значения;

- строим на интервале t∈ [0,T] заданным цветом график полученной зависимости;

- добавляем построенную кривую к общему графику.