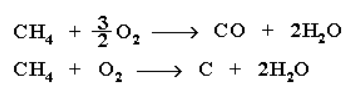
**Лабораторная работа 1 по Цифровому моделированию физико-химических систем**

**Варианты заданий**

1. Рассчитайте энтальпию образования газообразного ацетона при -0.1 °C и 1226.9 °C с использованием данных БД «Third Millennium…» (не учитывайте фазовый переход). Постройте график зависимости энтальпии образования газа-ацетона от температуры в диапазоне между этими двумя значениями температуры. Отметьте на графике значения энтальпии образования ацетона, найденные в базе данных Reaxys.

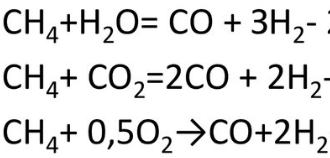
C3H6O = 3C + 3H2 + 1/2O2

1. Рассчитайте энтальпию сгорания ацетона при 25 °C с использованием данных БД «Third Millennium…» (не учитывайте фазовый переход). Постройте график зависимости энтальпии сгорания ацетона от температуры в диапазоне между 10 °C и 100 °C от температуры. Отметьте на графике значения энтальпии сгорания ацетона, рассчитанные Вами и найденные в базе данных Reaxys.
2. Постройте график зависимости энтальпии образования н-октана в диапазоне температур 400 K – 800 K от температуры с использованием данных БД «Third Millennium…». Сравните величину стандартной энтальпии образования при стандартной температуре со значением, найденным в базе данных Reaxys.
3. Постройте график зависимости энтальпии сгорания н-октана в диапазоне температур 400 K – 800 K от температуры с использованием данных БД «Third Millennium…». Сравните величину стандартной энтальпии сгорания при стандартной температуре со значением, найденным в базе данных Reaxys.
4. Постройте график зависимости энтальпии образования NO в диапазоне температур 200 K – 300 K от температуры с использованием данных БД «Third Millennium…». Сравните величину стандартной энтальпии образования при стандартной температуре со значением, найденным в базе данных Reaxys.
5. Постройте график зависимости теплового эффекта реакции CH4 + 2O2 = CO2 + 2H2O в диапазоне температур 500 K – 1000 K от температуры с использованием данных БД «Third Millennium…».
6. Рассчитайте с использованием данных БД «Third Millennium…» теплоту испарения этанола, температура данного фазового перехода 351.5 K.
7. Рассчитайте с использованием данных БД «Third Millennium…» теплоту испарения бензола, температура данного фазового перехода 353.3 K.
8. Рассчитайте с использованием данных БД «Third Millennium…» теплоту испарения анилина, температура данного фазового перехода 457.3 K.
9. Рассчитайте с использованием данных БД «Third Millennium…» теплоту испарения н-гексана, температура данного фазового перехода 333.1 K.
10. Рассчитайте с использованием данных БД «Third Millennium…» теплоту испарения толуола, температура данного фазового перехода 383.7 K.
11. Рассчитайте с использованием данных БД «Third Millennium…» теплоту испарения н-гептана, температура данного фазового перехода 371.57 K.
12. Рассчитайте с использованием данных БД «Third Millennium…» теплоту испарения н-октана, температура данного фазового перехода 398.75 K.
13. Рассчитайте с использованием данных БД «Third Millennium…» тепловой эффект реакции синтеза метанола СО + 2Н2 = СН3ОН при 525 K. Какова теплоемкость метанола при этой температуре?
14. С использованием данных БД «Third Millennium…» найдите тепловой эффект горения 1 моль метана при недостатке кислорода, которое описывается уравнениями



если известно, что метан сгорел полностью и образовалось 0,7 моль углерода.

1. С использованием данных БД «Third Millennium…» найдите тепловой эффект каждой из трех реакций процесса конверсии метана



Возможно ли проведение автотермического процесса (без затрат и выделения тепла, где тепловые эффекты реакций компенсируют друг друга) при грамотном подборе соотношения реагентов? Почему? А при отсутствии подачи CO2?

1. Постройте зависимость теплоемкости (Cp) н-октана с использованием данных БД «Third Millennium…» от температуры в диапазоне от 298 K до 600 K. На этом же графике постройте зависимость, найденную в базе данных NIST. Посчитайте относительную и абсолютную ошибку расчетных величин теплоемкости относительно данных NIST при 400 K.
2. Постройте зависимость теплоемкости (Cp) бутана с использованием данных БД «Third Millennium…» от температуры в диапазоне от 298 K до 600 K. На этом же графике постройте зависимость, найденную в базе данных NIST. Посчитайте относительную и абсолютную ошибку расчетных величин теплоемкости относительно данных NIST при 400 K.
3. Постройте зависимость теплоемкости (Cp) метана с использованием данных БД «Third Millennium…» от температуры в диапазоне от 298 K до 600 K. На этом же графике постройте зависимость, найденную в базе данных NIST. Посчитайте относительную и абсолютную ошибку расчетных величин теплоемкости относительно данных NIST при 400 K.
4. Постройте зависимость теплоемкости (Cp) этана с использованием данных БД «Third Millennium…» от температуры в диапазоне от 298 K до 600 K. На этом же графике постройте зависимость, найденную в базе данных NIST. Посчитайте относительную и абсолютную ошибку расчетных величин теплоемкости относительно данных NIST при 400 K.
5. Постройте график зависимости теплового эффекта реакции C3H6 + H2 = C3H8 в диапазоне температур 500 K – 1000 K от температуры с использованием данных БД «Third Millennium…».
6. Постройте график зависимости теплового эффекта реакции C2H4 + H2 = C2H6 в диапазоне температур 500 K – 1000 K от температуры с использованием данных БД «Third Millennium…».
7. Постройте график зависимости теплового эффекта реакции 2CO + 2NO = 2CO2 + N2 в диапазоне температур 500 K – 1000 K от температуры с использованием данных БД «Third Millennium…».
8. С использованием БД «Third Millennium…» постройте зависимости энтальпии от температуры для каждого из газов, участвующих в реакции 2CO + 2NO = 2CO2 + N2 в диапазоне температур 500 K – 1000 K. С помощью квадратичной аппроксимации предложите свои квадратичные зависимости энтальпии от температуры для каждого из газов. Вычислите тепловой эффект реакции при 500, 700, 1000 K с использованием ваших зависимостей и с использованием данных БД «Third Millennium…». Рассчитайте абсолютную и относительную ошибку в каждом случае.
9. С использованием БД «Third Millennium…» постройте зависимости энтальпии от температуры для каждого из газов, участвующих в реакции СО + 2Н2 = СН3ОН в диапазоне температур 500 K – 1000 K. С помощью квадратичной аппроксимации предложите свои квадратичные зависимости энтальпии от температуры для каждого из газов. Вычислите тепловой эффект реакции при 500, 700, 1000 K с использованием ваших зависимостей и с использованием данных БД «Third Millennium…». Рассчитайте абсолютную и относительную ошибку в каждом случае.
10. Рассчитайте, сколько тепла выделится при полном сгорании 5 моль бензола при 500 K с использованием БД «Third Millennium…».
11. Рассчитайте, сколько тепла выделится при полном сгорании 100 моль гексана при 700 K с использованием БД «Third Millennium…».
12. С использованием данных БД «Third Millennium…» постройте график зависимости энтальпии образования метана от температуры в диапазоне между 300 K и 600 K.
13. С использованием данных БД «Third Millennium…» постройте график зависимости энтальпии образования этана от температуры в диапазоне между 300 K и 600 K.
14. С использованием данных БД «Third Millennium…» постройте график зависимости энтальпии образования этилена от температуры в диапазоне между 400 K и 700 K.
15. С использованием данных БД «Third Millennium…» постройте график зависимости энтальпии образования пропана от температуры в диапазоне между 400 K и 700 K.
16. С использованием данных БД «Third Millennium…» постройте график зависимости энтальпии образования гексана от температуры в диапазоне между 700 K и 1000 K.
17. С использованием данных БД «Third Millennium…» постройте график зависимости энтальпии образования гептана от температуры в диапазоне между 700 K и 1000 K.
18. С использованием данных БД «Third Millennium…» постройте график зависимости энтальпии образования бензофурана от температуры в диапазоне между 700 K и 1000 K.
19. С использованием данных БД «Third Millennium…» постройте график зависимости энтальпии образования радикала C2HBr2 от температуры в диапазоне между 2000 K и 4000 K.
20. С использованием данных БД «Third Millennium…» постройте график зависимости энтальпии образования радикала CBr3 от температуры в диапазоне между 2000 K и 4000 K.

**Варианты 37-52**. (проверка термодинамической согласованности данных термодинамики и кинетики)

Исследователь получил оценки коэффициентов a0..a7 для различных возможных частиц, участвующих в каталитической реакции окисления CO с использованием катализатора «оксид меди-диоксид церия».

CO 0.03262452E+02 0.01511941E-01 -0.03881755E-04 0.05581944E-07 -0.02474951E-10 -0.01431054E+06 0.04848897E+02

CO2 0.02275725E+02 0.09922072E-01 -0.01040911E-03 0.06866687E-07 -0.02117280E-10 -0.04837314E+06 0.01018849E+03

O2 0.03212936E+02 0.01127486E-01 -0.05756150E-05 0.01313877E-07 -0.08768554E-11 -0.01005249E+05 0.06034738E+02

H2 0.03298124E+02 0.08249442E-02 -0.08143015E-05 -0.09475434E-09 0.04134872E-11 -0.01012521E+05 -0.03294094E+02

H2O 0.03386842E+02 0.03474982E-01 -0.06354696E-04 0.06968581E-07 -0.02506588E-10 -0.03020811E+06 0.02590233E+02

Cu(s2) 1.76672074E+00 7.34699433E-03 -1.54712960E-05 1.50539592E-08 -5.24861336E-12 -7.43882087E+02 -7.70454044E+00

CeO2(s) -1.63411394E+00 5.66371664E-02 -1.19093012E-04 1.15302125E-07 -4.19956349E-11 -1.32290149E+05 4.27394897E+00

Ce2O3(s4) -3.40581257e+00 1.04207810e-01 -2.16250767e-04 2.05489755e-07 -7.33505319e-11 -2.46529303e+05 6.79746734e+00

Cu(s) 1.26197231e+00 4.26967664e-02 1.30712943e-04 3.68506950e-07 5.30399514e-10 6.96301194e+04 2.63361694e+01

Cu(s3) 1.60044064e+00 3.44756251e-03 -3.83231798e-06 1.40142396e-09 6.89087125e-13 -2.50517802e+04 -1.05925277e+01

CuCO3(s) 1.26388257e+00 7.86940344e-02 4.86090019e-05 4.59749322e-07 4.92432655e-10 -2.40638729e+04 3.68665815e+01

CuH2O(s2) 2.38076842e+00 3.11178274e-02 -7.52443107e-05 8.29419519e-08 -3.33949544e-11 -3.88170322e+04 -7.33530616e+00

CuH2O(s3) 2.21448831e+00 2.72183956e-02 -6.36053327e-05 6.92894167e-08 -2.74572540e-11 -5.99720580e+04 -6.36578052e+00

CuO(s2) 1.82749693e+00 1.33267913e-02 -2.88657660e-05 3.04379136e-08 -1.16891114e-11 -2.93354085e+04 -3.21051417e+00

CuO(s3) 1.99377703e+00 1.72262231e-02 -4.05047440e-05 4.40904488e-08 -1.76268119e-11 -1.64454433e+03 -5.55887275e+00

OCu(s) 1.36115275e+00 5.02199263e-02 1.13048080e-04 3.88756174e-07 5.21858896e-10 3.41161831e+04 3.11076831e+01

OCuCO(s) 1.68845373e+00 6.99557075e-02 6.28403080e-05 4.46549703e-07 4.97574188e-10 1.11857619e+04 3.44972139e+01

OCuCO2(s) 1.26388257e+00 7.86940344e-02 4.86090019e-05 4.59749322e-07 4.92432655e-10 -2.11666015e+04 3.63646473e+01

OCuO(s) 1.35558287e+00 5.79861196e-02 9.60699278e-05 4.07595478e-07 5.13998095e-10 -1.14018550e+03 3.31631267e+01

OCuOCO(s) 1.64971082e+00 7.86150989e-02 4.40703149e-05 4.67116681e-07 4.89003236e-10 -1.84553450e+04 3.74803554e+01

**Вариант:**

1. OCuO(s) + CO => OCuOCO(s)
2. OCuOCO(s) => OCuCO2(s)
3. OCuCO2(s) => OCu(s) + CO2
4. OCu(s) + CO => OCuCO(s)
5. OCuCO2(s) => CuCO3(s)
6. OCuCO(s) + 2CeO2(s) => OCuOCO(s) + Ce2O3(s4)
7. OCu(s) + 2CeO2(s) => OCuO(s) + Ce2O3(s4)
8. Cu(s) + 2CeO2(s) => OCu(s) + Ce2O3(s4)
9. 2Cu(s2) + O2 => 2CuO(s3)
10. 2Ce2O3(s4) + O2 => 4CeO2(s)
11. 2CuO(s2) + H2 => CuH2O(s3) + CuO(s3)
12. Cu(s3) + H2O => CuH2O(s3)
13. CuO(s3) + Cu(s3) + H2 => CuH2O(s2) + Cu(s2)
14. Cu(s2) + H2O => CuH2O(s2)
15. OCuO(s) + Cu(s2) => OCu(s) + CuO(s2)
16. OCu(s) + Cu(s2) => Cu(s) + CuO(s2)

Также исследователь получил на основе кинетической модели реакций средние значения энтальпии реакции в диапазоне температур 300-700 K

37. -27991.2

38. -22353.2

39. 60854.7

40. -74906.2

41. -24087.9

42. -96381

43. -143296

44. -146608

45. -9838.34

46. -295860

47. -20233.2

48. -41456.5

49. -102698

50. -67669.5

51. 54952.2

52. 56131.8

Для стадии реакции с номером, равным номеру вашего варианта, рассчитать значения энтальпии реакции с помощью полинома NASA при 9 значениях температуры, выбранных равномерно на интервале 300-700 K (концы интервала входят в число девяти значений).

Построить график, показывающий, как согласуются рассчитанные значения с данным в задаче средним значением энтальпии реакции.