Химические реакции, стохастическое горение

Этап №1

Саргсян А. Г. Тасыбаева Н. С. Алхатиб Осама Саинт-Амур Исмаэль Тазаева А. А. Юсупов Ш. Ф.

2023 год

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

Цели и задачи проекта

Цель проекта: на основе построения ансамбля частиц, в которых возможна мономолекулярная экзотермическая реакция, изучить принципы математического моделирования

Цели и задачи проекта

Задачи проекта:

- 1. изучить теоретическую информацию об экзотермитеских реакциях;
- 2. разработать алгоритмы, позволяющие:
 - смоделировать реакцию горения;
 - исследовать случаи нулевой и бесконечной теплопроводности вещества на реакцию;
 - сравнить количество прореагировавшего вещества от температуры;
- 3. написать программу, воспользовавшись разработанными в процессе изучения задания алгоритмами;
- 4. проанализировать полученные результаты.

Смысл понятия «экзотермитечкая реакция»

Экзотермическая реакция — химическая реакция или ядерная реакция, сопровождающаяся выделением теплоты. По знаку тепловыделения противоположна эндотермической реакции — реакции с поглощением теплоты.

$$2H_2 + O_2 \ o 2H_2O + 483.6$$
КДж

Практические примеры

рис. 1 процесс реакции сварки рельсов



Практические примеры

рис.2 Термитная сварка рельсов



Используемые физические величины

- E энергия текущего состояния атома
- E_a энергия активации
- k постоянная Больцмана
- T- абсолютная температура, измеряемая в Кельвинах
- T_0 постоянная температура непрореагировавших молекул
- c теплоемкость одной молекулы
- N количество молекул вещества
- $\,u$ скорость химической реакции, приведенная к одной молекуле
- $\,N_0$ количество молекул вещества при температуре ${
 m T0}$

Выводы

В работе мы рассмотрели экзотермическую реакцию, что она из себя представляет и как она происходит. Так же мы познакомились с основными понятиями, которые используются при изучении и построении уравнений и моделей химических реакций.