

Univerza v Ljubljani  
Fakulteta za *matematiko in fiziko*



# Modeli kemijskih reakcij

5. naloga pri Modelski Analizi 1

**Avtor:** Marko Urbanč (28232019)  
**Predavatelj:** prof. dr. Simon Širca  
**Asistent:** doc. dr. Miha Mihovilovič

8.11.2023

## Kazalo

<b>1</b>	<b>Uvod</b>	<b>2</b>
1.1	Binarna reakcija . . . . .	2
1.2	Sinteza vodikovega bromida . . . . .	3
1.3	Kemijska ura . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Naloga</b>	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Opis reševanja</b>	<b>4</b>
<b>4</b>	<b>Rezultati</b>	<b>4</b>
<b>5</b>	<b>Komentarji in izboljšave</b>	<b>4</b>
	<b>Literatura</b>	<b>5</b>

# 1 Uvod

Čeprav smo fiziki in smo na študiju fizike, ne moremo zanikati, da je tudi kemija pomembna veda. A izkaže se, da ni vedno najbolj ugodno narediti prav vsak eksperiment v živo. Zato se je razvil računalniški pristop, ki nam omogoča, da lahko simuliramo različne kemijske reakcije. Pravzaprav je pristop praktično analogen prejšnji nalogi o populacijskih modelih. No vsaj ko naredimo ustrezne približke. V resnici, če bi hoteli brez kompromisa modelirati kemijske procese, bi nas to drago stalo. To mislim dobesedno, ker če bi reševali t.i. **Chemical master equation** bi dobili sistem ODE s toliko komponent, kolikor je možnih stanj sistema. To pa je, če želimo simulirati nek makroskopski proces, zelo veliko. Zato se bomo v tej nalogi omejili na reševanje **Reaction rate** enačb, ki so približek prej omenjenih enačb. V tej nalogi bomo spoznali modeliranje kemijskih procesov na podlagi treh primerov.

## 1.1 Binarna reakcija

Za prvi primer si pogledjmo primer binarne reakcije. Kemijske procese lahko opišemo kot:



Rate enačbe v brezdimenzijski obliki za proces dobimo tako, da vse koncentracije normiramo z začetno koncentracijo snovi  $A$   $[A](0)$ . S tem bomo lahko uvedli še nove parametre. Takole:

$$\dot{a} = \frac{1}{2}kaa^* - a^2 + \frac{1}{2}a^2 , \quad (3)$$

$$\dot{a}^* = \frac{1}{2}a^2 - \frac{1}{2}kaa^* - ska^* , \quad (4)$$

$$\dot{b} = \frac{1}{2}ska^* , \quad (5)$$

$$\dot{c} = \frac{1}{2}ska^* . \quad (6)$$

kjer je  $k = \frac{p}{q}$  in  $s = \frac{r}{q[A](0)}$ . Odvod pa je zdaj po  $d\tau = p[A](0) dt$ . Lahko predpostavimo, da v ravnovesnem stanju velja  $\dot{a}^* = 0$ , kar nam omogoči, da izrazimo  $a^*$  in s tem dobimo nov set enačb:

$$\dot{a} = \frac{a^3}{4k(s + a/2)} - a^2 , \quad (7)$$

$$\dot{a}^* = 0 , \quad (8)$$

$$\dot{b} = \frac{sa^2}{4(s + a/2)} , \quad (9)$$

$$\dot{c} = \frac{sa^2}{4(s + a/2)} . \quad (10)$$

## 1.2 Sinteza vodikovega bromida

Za drugi primer pogledamo primer sinteze vodikovega bromida. Sinteza je sestavljena iz več stopnj. Te lahko zapišemo kot:



To lahko z sistemom ODE opišemo kot prej takole:

$$\dot{u} = sxy - ruz , \quad (14)$$

$$\dot{v} = qz^2 - pv - \frac{1}{2}tvy , \quad (15)$$

$$\dot{x} = \frac{1}{2}tvy - \frac{1}{2}sxy + \frac{1}{2}ruz , \quad (16)$$

$$\dot{y} = \frac{1}{2}ruz - \frac{1}{2}sxy + \frac{1}{2}tvy , \quad (17)$$

$$\dot{z} = \frac{1}{2}tvy + pv - qz^2 , \quad (18)$$

kjer je  $u = [\text{H}_2]$ ,  $v = [\text{Br}_2]$ ,  $x = [\text{HBr}]$ ,  $y = [\text{H}]$  in  $z = [\text{Br}]$ . Tudi ta sistem lahko zapišemo v približku stacionarnega stanja, kjer velja  $\dot{y} = 0$  in dobimo:

$$\dot{u} = -\frac{1}{2}tvy , \quad (19)$$

$$\dot{v} = qz^2 - pv - \frac{1}{2}tvy , \quad (20)$$

$$\dot{x} = tvy , \quad (21)$$

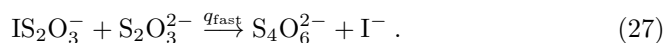
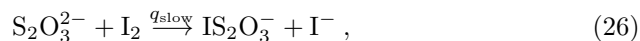
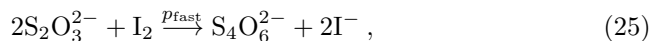
$$\dot{y} = 0 , \quad (22)$$

$$\dot{z} = \frac{1}{2}tvy + pv - qz^2 . \quad (23)$$

Na predavanjih je profesor omenil še možnost stacionarnega stanja za  $\dot{z} = 0$ , ampak meni ni uspelo uspešno pognati reakcije v tem primeru.

## 1.3 Kemijska ura

Za konec pa še bolj zabaven primer, kemijska ura. Princip je, da imamo dve reakciji, ki se odvijata vzporedno. Prva reakcija je hitra, druga pa počasna. Ko se prva reakcija konča, se začne druga in s tem se spremeni barva raztopine. Pravzaprav imamo dve reakciji za vsako od barv, torej dve hitri in dve počasni. To lahko zapišemo kot:



To sem modeliral kar po isti metodi kot prej. Označil sem  $u = [\text{S}_2\text{O}_8^{2-}]$ ,  $v = [\text{IS}_2\text{O}_8^{3-}]$ ,  $w = [\text{SO}_4^{2-}]$ ,  $x = [\text{S}_2\text{O}_3^{2-}]$ ,  $y = [\text{IS}_2\text{O}_3^-]$ ,  $z = [\text{S}_4\text{O}_6^{2-}]$  in  $m = [\text{I}^-]$  ter  $n = [\text{I}_2]$ . Dobimo 8D sistem:

$$\dot{m} = -p_{\text{slow}}mu - p_{\text{fast}}mv + q_{\text{slow}}xn + q_{\text{fast}}xy , \quad (28)$$

$$\dot{n} = p_{\text{fast}}mv - q_{\text{slow}}xn , \quad (29)$$

$$\dot{u} = -p_{\text{slow}}mu , \quad (30)$$

$$\dot{v} = p_{\text{slow}}mu - p_{\text{fast}}mv , \quad (31)$$

$$\dot{w} = p_{\text{fast}}mv , \quad (32)$$

$$\dot{x} = -q_{\text{slow}}nx - q_{\text{fast}}xy , \quad (33)$$

$$\dot{y} = q_{\text{slow}}nx - q_{\text{fast}}xy , \quad (34)$$

$$\dot{z} = q_{\text{fast}}xy . \quad (35)$$

## 2 Naloga

Naloga nas prosi, da za binarne reakcije integriramo sistem eksaktno in v aproksimaciji stacionarnega stanja za različne vrednosti  $s$  pri čemer je  $k = 1000$ . Za sintezo vodikovega bromida pa naj v približku stacionarnega stanja določimo empirični konstanti  $k$  in  $m$  izrazu:

$$[\text{HBr}] = \frac{k[\text{H}_2][\text{Br}_2^{1/2}]}{m + [\text{HBr}]/[\text{Br}_2]} \quad (36)$$

Skicirajmo naj poteke za hitrost sinteze vodikovega bromida v odvisnosti od začetne koncentracije  $\text{H}_2$  in  $\text{Br}_2$ . Kaj se zgodi če primešamo mnogo  $\text{HBr}$ ?

Na koncu pa še narišimo potek koncentracij  $m$ ,  $n$  za kemijsko uro, kjer spreminjamo razmerje hitrosti glavnih reakcij.

## 3 Opis reševanja

## 4 Rezultati

## 5 Komentarji in izboljšave

## Literatura