



СУНЦ МГУ, кафедра химии
Лаборатория высокочистых веществ ИОНХ РАН

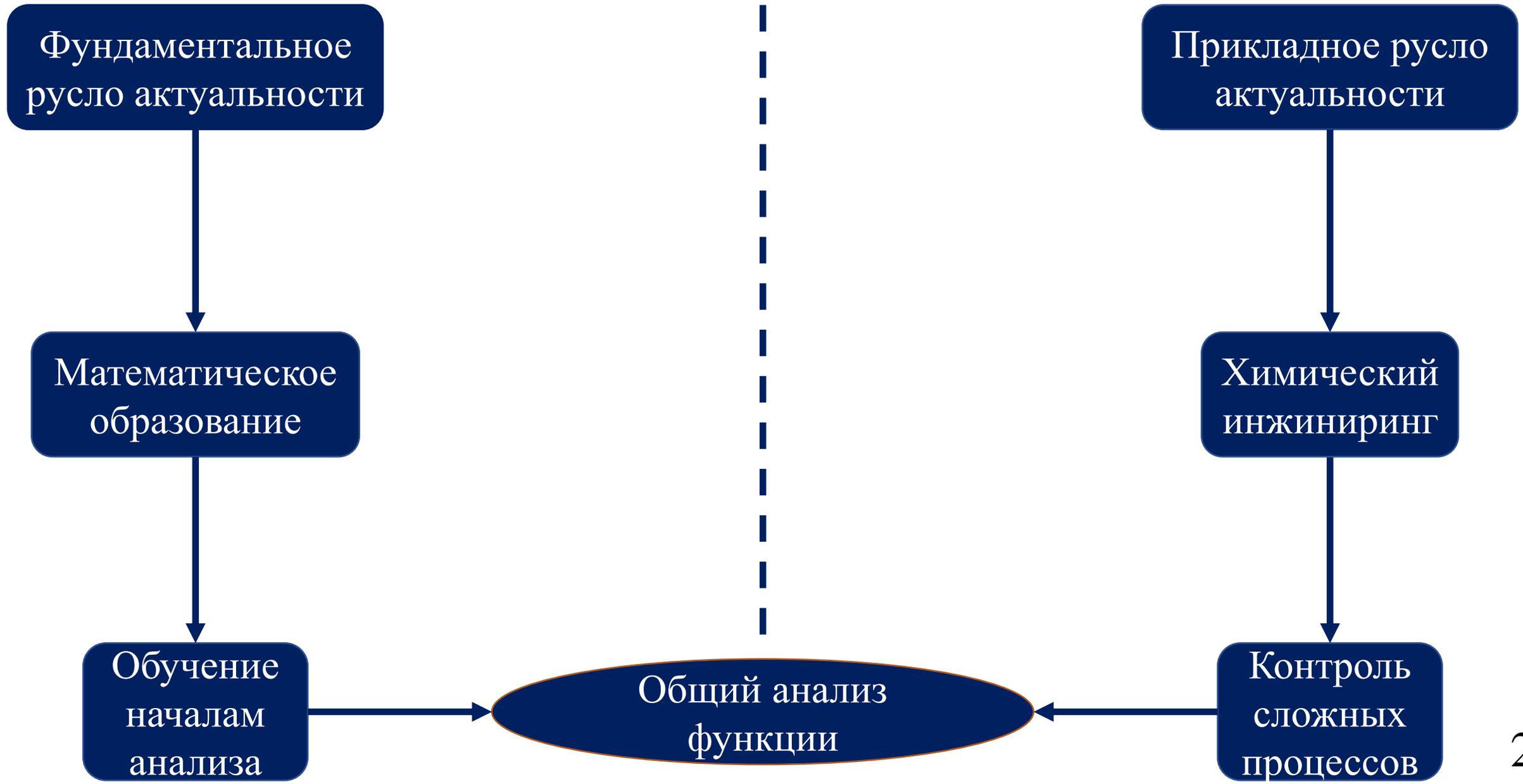


Исследование кинетических уравнений элементарных реакций методом общего анализа функций

Курсовая работа
Уч. 11“Х” Денисова Д.С.
Научный руководитель:
Асп. I г.о.
Ваймугин Л.А.

Москва 2023 г.

Актуальность работы



Цель и задачи работы

Цель работы – рассмотрение кинетических кривых разных типов элементарных реакций при помощи подходов математического анализа.

Задача работы:

Исследование кинетических уравнений простых реакций как функций концентрации от времени

Источники

Кинетика простых реакций

Учебники

- 1) "Теоретическая и математическая химия" В. В. Еремин
- 2) "Physical Chemistry " Peter Atkins

Справочники

- 1) "Краткий справочник Физико-Химических величин" под редакцией К.П. Мищенко и А.А. Равделя

Задачники

- 1) "Сборник задач по химической кинетике" Н.А. Колпакова.
- 2) "Теоретическая и математическая химия" В. В. Еремин

Источники

Общий анализ функций от одной переменной

```
graph TD; A[Общий анализ функций от одной переменной] --> B[Учебники]; A --> C[Задачники]; B --> D["1) \"Математический анализ. Дифференцирование функций одной переменной\" Садовничая И.В.  
2) \"Математический анализ\" часть 1,2 Зорич В. А."]; C --> E["1) «Сборник задач и упражнений по математическому анализу» Демидович Б. П.  
2) «Задачи и упражнения по математическому анализу» Виноградова И.А., Олехник С.Н., Садовничий В.А."];
```

Учебники

- 1) "Математический анализ. Дифференцирование функций одной переменной" Садовничая И.В.
- 2) "Математический анализ" часть 1,2 Зорич В. А.

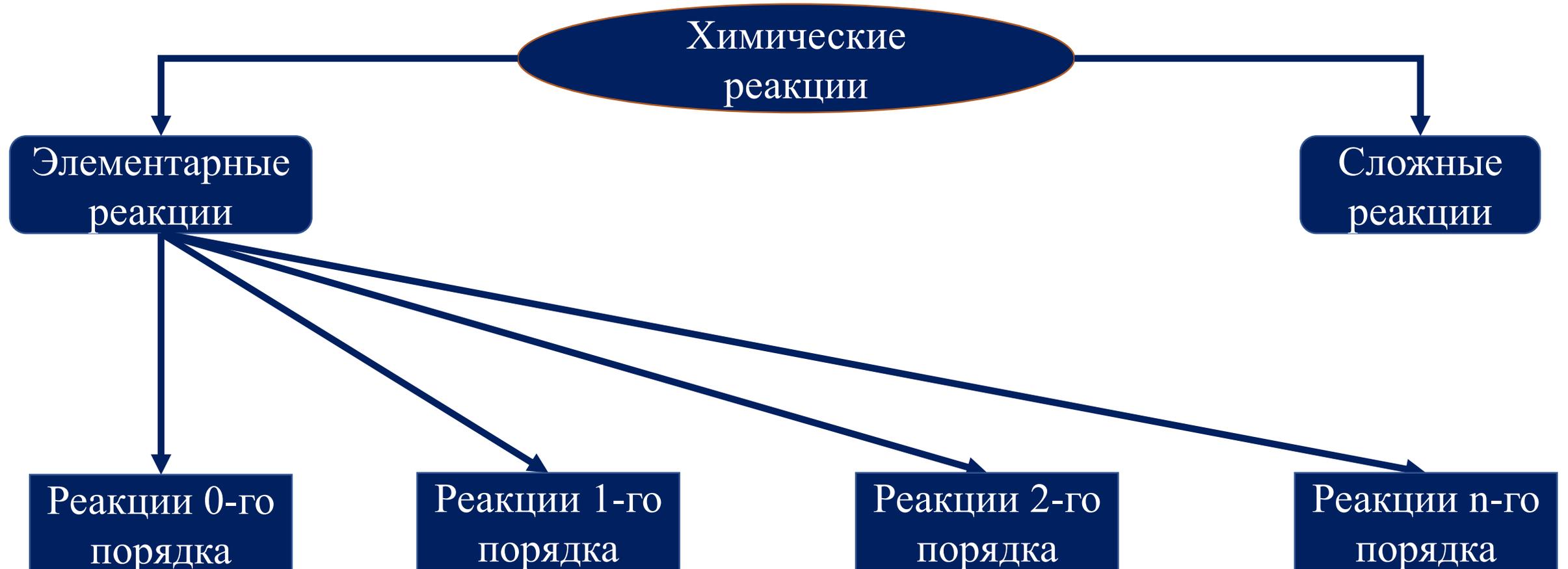
Задачники

- 1) «Сборник задач и упражнений по математическому анализу» Демидович Б. П.
- 2) «Задачи и упражнения по математическому анализу» Виноградова И.А., Олехник С.Н., Садовничий В.А.

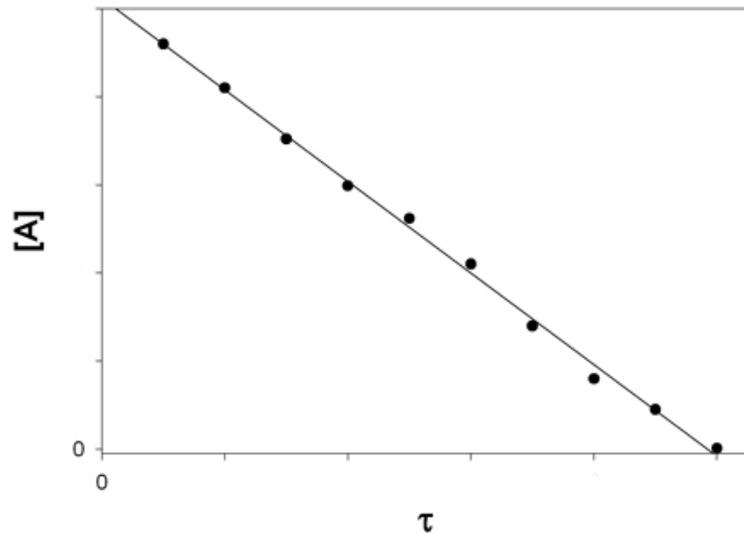
Общий анализ функций от одной переменной



Кинетические кривые



Реакции 0-го порядка



Пример: $C + O_2 \rightarrow CO_2 (Pt)$

Уравнение: $C(t) = C_0 - kt$

(1) $D(f): 0 \leq t \leq \frac{C_0}{k}$

(2) $E(f): 0 \leq C \leq C_0$

(3) *рос на $D(f)$*

(4) Φ – ия общего вида, неперiodичн

(5) нули ϕ – ии : $f(0) = C_0$, $f\left(\frac{C_0}{k}\right) = 0$

(6) $\dot{f}(t) = -k$

(7) $\dot{f}(t) = 0$

(8) $\max - f(0) = C_0$, $\min - f\left(\frac{C_0}{k}\right) = 0$

Реакции 1-го порядка

Уравнение: $C(t) = C_0 \cdot e^{-kt}$

$$\ln(C) = \ln(C_0) - kt$$

(1) $D(f): t \geq 0$

(2) $E(f): 0 < C \leq C_0$

(3) *рос на $D(f)$*

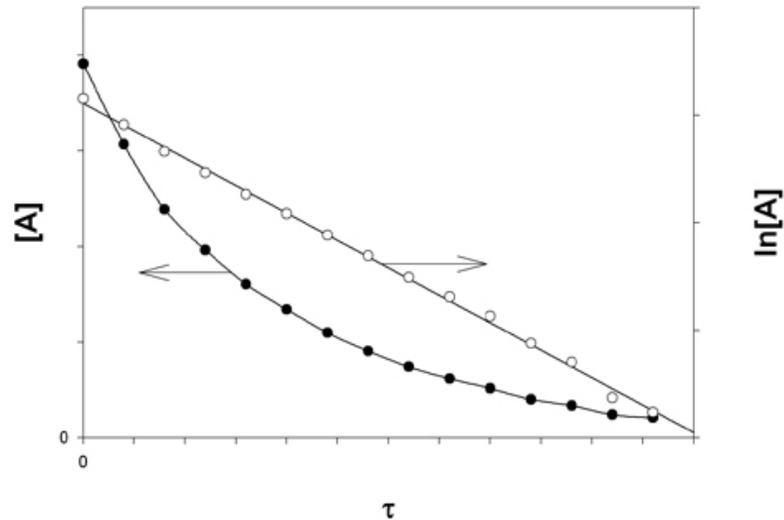
(4) Φ – ия общего вида, неперiodичн.

(5) нули функции $f(0) = C_0$

(6) $\dot{f}(t) = -C_0 \cdot k \cdot e^{-kt}$

(7) $\ddot{f}(t) = C_0 \cdot k^2 \cdot e^{-kt}$

(8) $\max - f(0) = C_0$; \min нет, при $t \rightarrow \infty f(t) \rightarrow 0$



Пример: $N_2O_5 \rightarrow 2NO_2 + 0,5O_2$

Реакции 2-го порядка

Уравнение: $\frac{1}{C} = \frac{1}{C_0} + kt$ $C = \frac{C_0}{1 + C_0kt}$

(1) $D(f): t \geq 0$

(2) $E(f): 0 < C \leq C_0$

(3) *рос на $D(f)$*

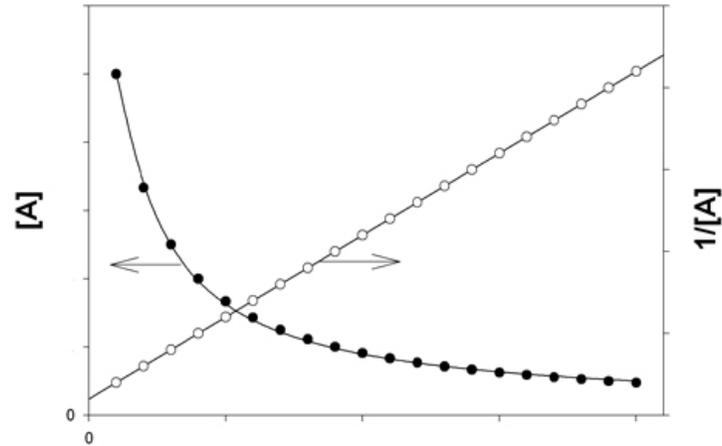
(4) Φ — *ия общего вида, неперiodичн.*

(5) нули функции $f(0) = C_0$

(6) $\dot{f}(t) = -\frac{kC_0^2}{(1 + kC_0t)^2}$

(7) $\ddot{f}(t) = \frac{k^2C_0^3}{(1 + kC_0t)^3}$

(8) $\max - f(0) = C_0$; \min нет, при $t \rightarrow \infty$ $f(t) \rightarrow 0$



Пример: $2HI \rightarrow H_2 + I_2$

Реакции n-го порядка

Уравнение: $(n - 1)kt = \frac{1}{C^{n-1}} - \frac{1}{C_0^{n-1}}$

(1) $D(f): t \geq 0$

(2) $E(f): 0 < C \leq C_0$

(3) *рос на $D(f)$*

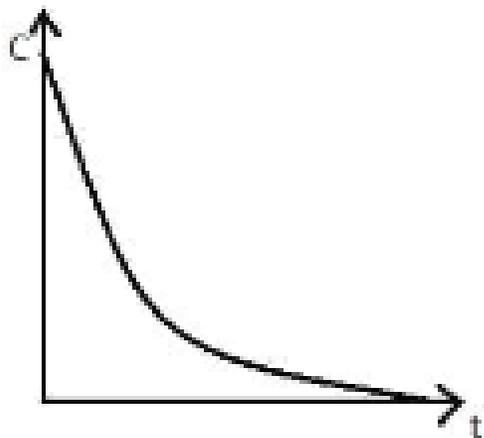
(4) Φ – ия общего вида, неперiodичн.

(5) нули функции $f(0) = C_0$

(6) $\dot{f}(t) = -\frac{C_0^{2n-2} \cdot k \cdot (n-1)}{((n-1) \cdot k \cdot t \cdot C_0^{n-1} + 1)^2}$

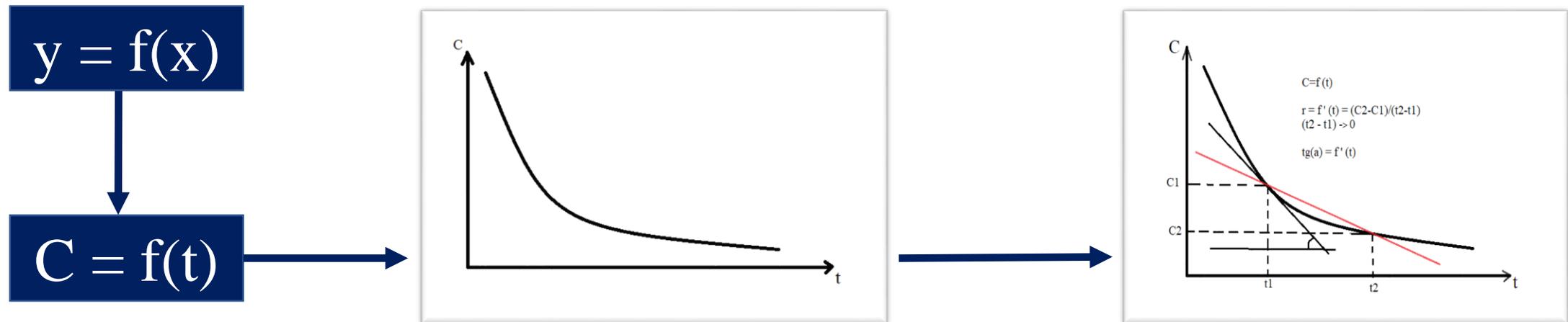
(7) $\ddot{f}(t) = \frac{2C_0^{3n-3} \cdot k^2 \cdot (n-1)^2}{((n-1) \cdot k \cdot t \cdot C_0^{n-1} + 1)^3}$

(8) $\max - f(0) = C_0$; \min нет, при $t \rightarrow \infty$ $f(t) \rightarrow 0$



Выводы

- 1) При помощи общего анализа функций от одной переменной выявлены особенности кинетических уравнений как зависимостей концентрации от времени (область допустимых значений, область определения функции, области знакопостоянства, тип функции, нули функции, первая и вторая производные, а также максимумы и минимумы).
- 2) Обнаружена возможная практическая польза общего анализа функций от одной переменной при кинетическом проектировании химических реакций.



Список литературы

1. Еремин В. В. Теоретическая и математическая химия для школьников. Подготовка к химическим олимпиадам / М.: МЦНМО. 2018. 640 с.
2. Atkins P., Paula J., Keeler J. Physical chemistry. 11-th edition / Oxford University press. 2018. 939 p.
3. Мищенко К. П., Равделя А. А. Краткий справочник физико-химических величин. 7-е издание / Л.: Химия. 1974. 200 с.
4. Колпакова Н. А., Романенко С. В., Колпаков В. А. Сборник задач по химической кинетике: учебное пособие / Томск: Изд-во Томского политехнического университета. 2009. 280 с.
5. Садовничая И.В., Фоменко Т.Н., Хорошилова Е.В. Математический анализ. Дифференцирование функций одной переменной. 2-е изд.: учебное пособие для академического бакалавриата / М.: Изд-во “Юрайт”. 2023. 156 с.
6. Зорич В. А. Математический анализ. Часть I. 10-е издание / М.: МЦНМО. 2019. 564 с.
7. Зорич В. А. Математический анализ. Часть II. 9-е издание / М.: МЦНМО. 2019. 676 с.
8. Демидович Б. П. Сборник задач и упражнений по математическому анализу: учебное пособие / М.: Изд-во Московского университета. 1997. 624 с.
9. Виноградова И.А., Олехник С.Н., Садовничий В.А. Математический анализ в задачах и упражнениях: учебное пособие / М.: Изд-во Московского университета. 1991. 352 с.

Спасибо за внимание!