

Создание программы по расчету кинетики химических реакций

Автор: Парьев Артём 10Л
Москва, СУНЦ МГУ
Научный руководитель:
Морозова Наталья Игоревна

Цель

Создание программы по расчету кинетики химических реакций.

Задачи

- 1) Изучить зависимость концентрации вещества от времени.
- 2) Построить алгоритм расчета этой зависимости.
- 3) Реализовать его с помощью Python.

Зависимости концентрации от времени для реакций разных типов

1 порядок



$$C = C_0 \times e^{-k \times t}$$

2 порядок



$$C = 1/(k \times t + 1/C_0)$$

3 порядок



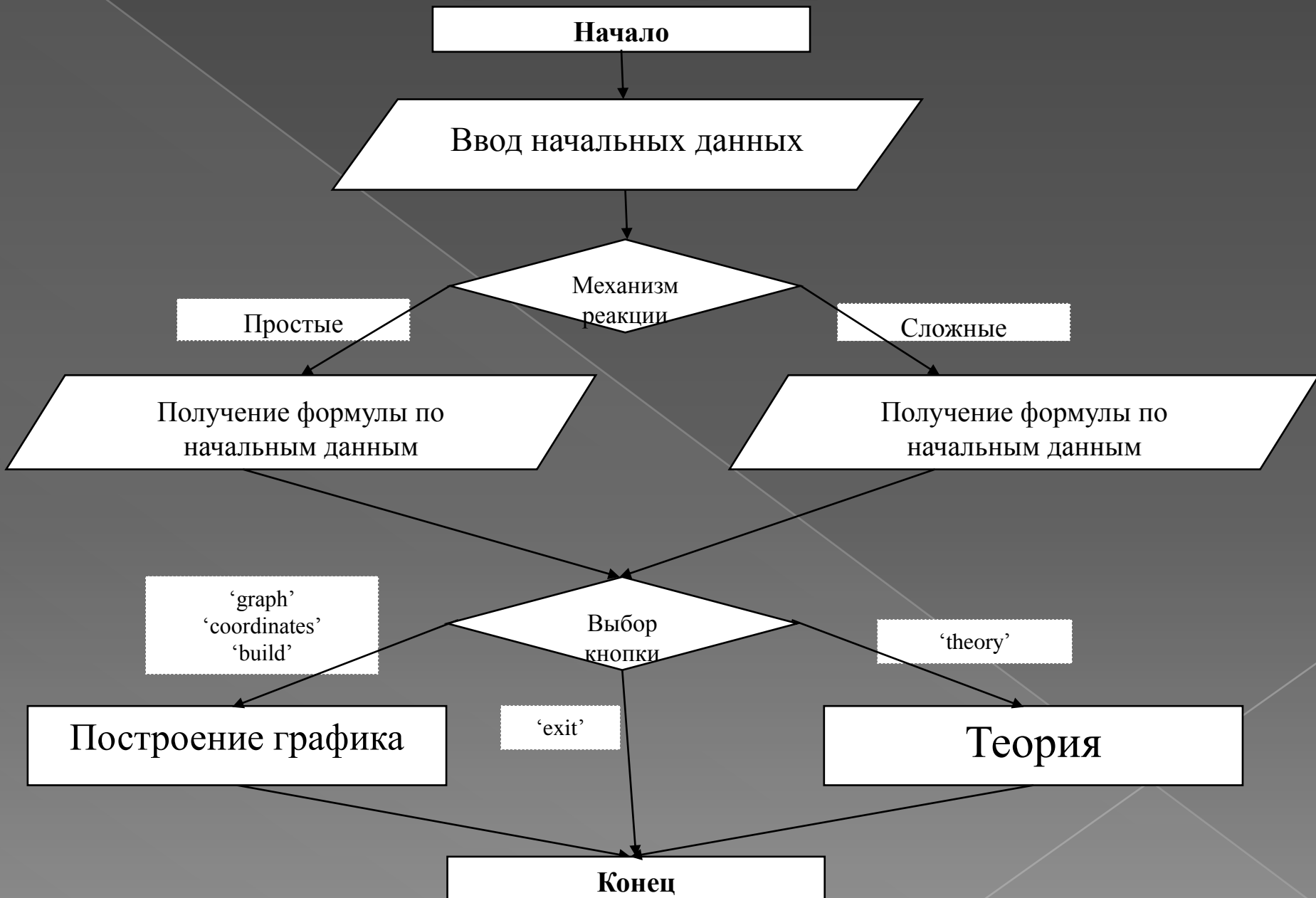
$$C = \sqrt{1/(2 \times k \times t + 1/C_0^2)}$$

Параллельные
реакции (1 порядка)

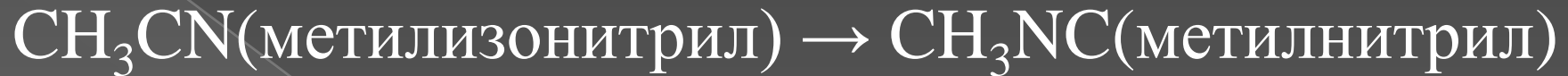


$$C = C_0 \times e^{-(k_1 + \dots + k_n) \times t}$$

Алгоритм программы



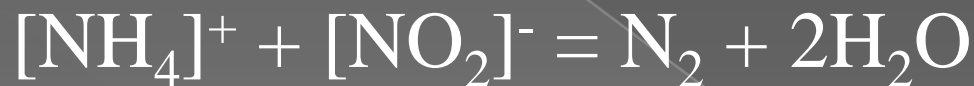
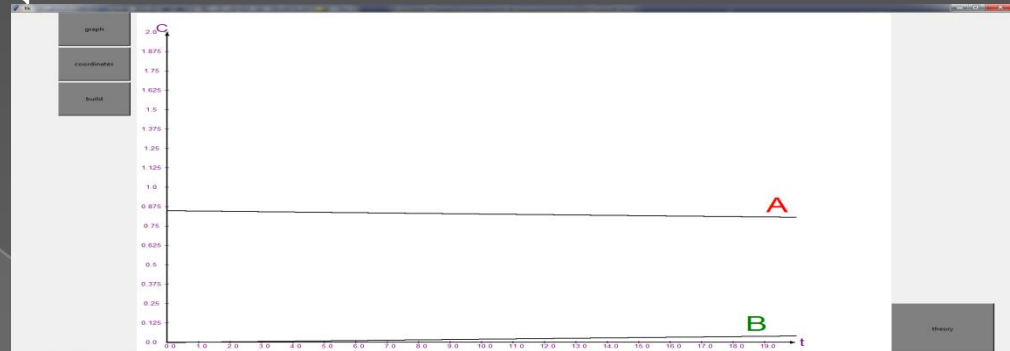
Примеры



– реакция первого порядка

$$k = 0,0000511 \text{ л/моль} \cdot \text{с},$$

$$C_0 = 0,85 \text{ моль/л.}$$

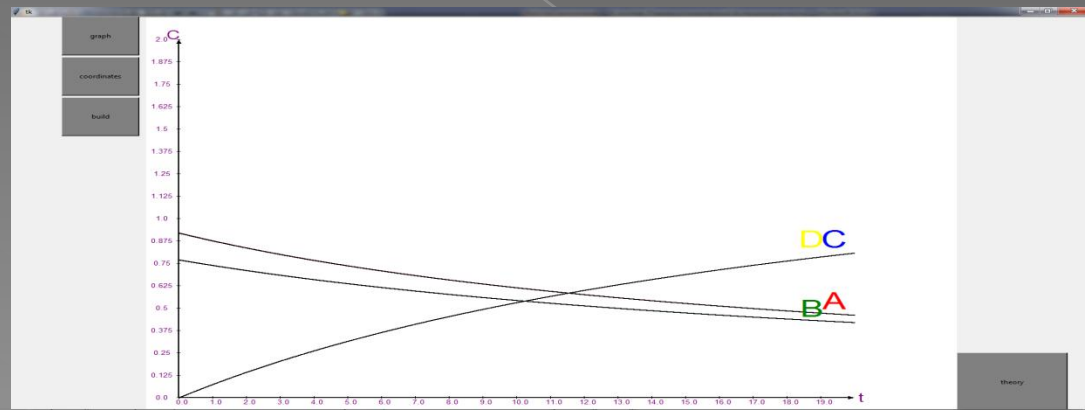


– реакция второго порядка (при 25 градусах)

$$k = 0,00027 \text{ л/моль} \cdot \text{с},$$

$$C_1 = 0,92 \text{ моль/л},$$

$$C_2 = 0,77 \text{ моль/л.}$$



Результат

Какой механизм реакции? (простой(1) или сложный(2))

1 2

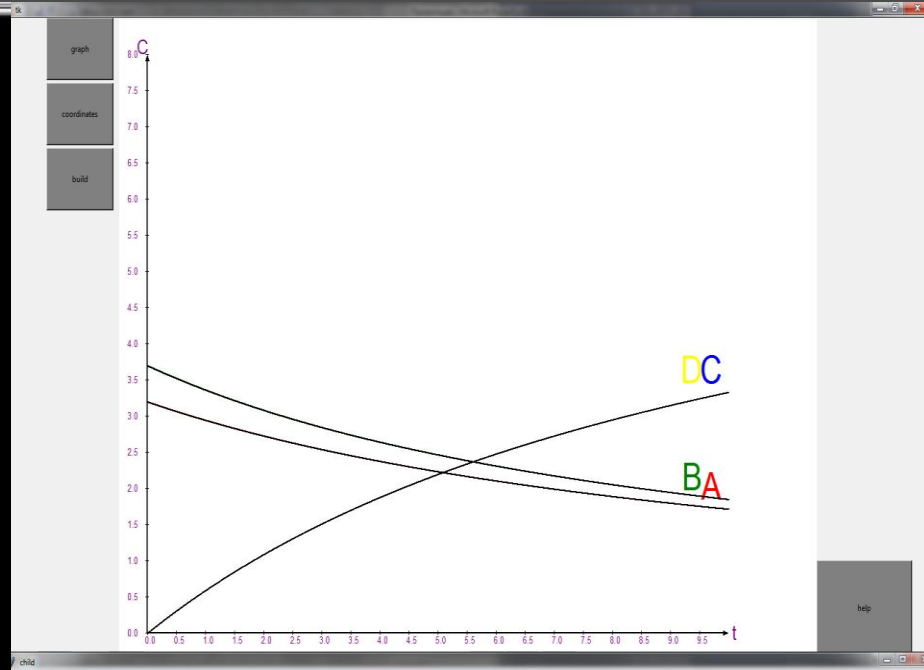
Укажите порядок реакции (1,2,3)

1 2 3

Выбери схему реакции. а) A=B, б) A=2B; в) A=B+C; д) A=2B+C

а б в д

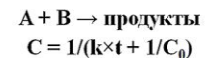
Введите константу скорости и концентрацию вещества



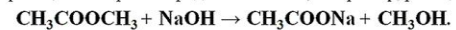
2 ПОРЯДОК



К реакциям второго порядка принадлежат реакции, скорость которых пропорциональна концентрации каждого из реагирующих веществ или квадрату концентрации одного из них :

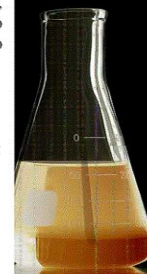


К реакциям второго порядка относится, например, реакция:



Возможные схемы реакций:

- 1) $2A=B$
- 2) $A+B=2C$
- 3) $A+B=C+D$
- 4) $A+B=C$
- 5) $2A=B+C$



Перспективы

- 1) Построение графиков для дробных, нулевых и отрицательных порядков.
- 2) Дополнительная теория.
- 3) Самостоятельный расчет программой константы скорости.
- 4) Тесты по теме «Кинетика химических реакций»

Используемая литература

1. Коренев Ю.М., Овчаренко В.П., Морозова Н.И. Общая неорганическая химия. Часть 3. Основы химической термодинамики и кинетики. – М.: МАКС Пресс, 2010. – 88 с.

2. Мультимедийный курс «Кинетика химических реакций».
http://twt.mpei.ac.ru/ТТНВ/Chem_Kinetic/index.html#_Тoc138221252
– 05.12.2016.

3 Физическая химия.

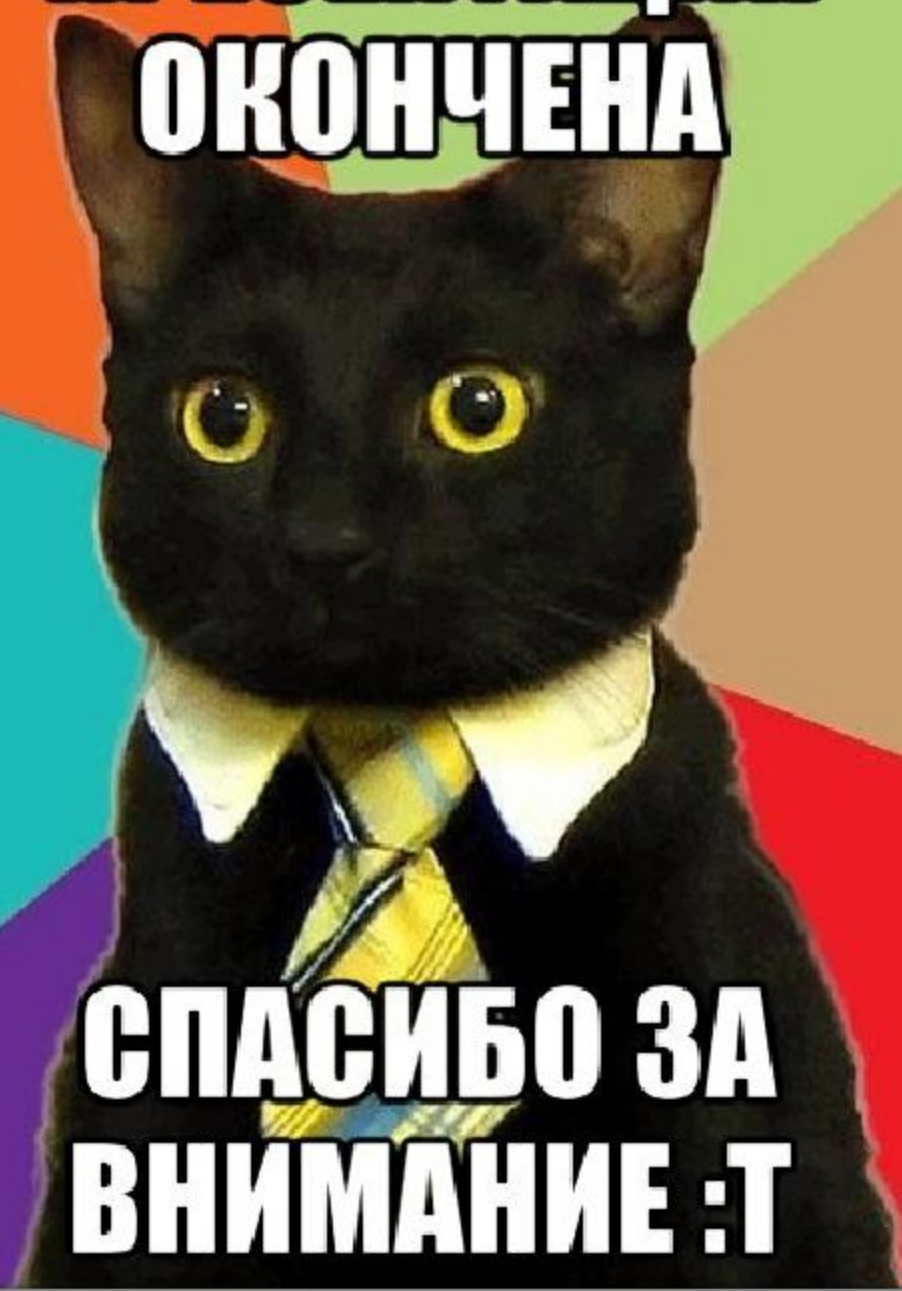
http://otherreferats.allbest.ru/chemistry/00002837_1.html – 06.12.2016.

4. Жолнин А.В. Общая химия. – Москва, 2012. – 400 с.

5. Скорость химической реакции. http://www.e-ng.ru/ximiya/skorost_ximicheskoi_reakcii.html – 06.12.2016.

6. Г. Россум, Ф.Л.Дж. Дрейк, Д.С. Откидач. Язык программирования Python. – Москва, 2001. – 454 с.

**ПРЕЗЕНТАЦИЯ
ОКОНЧЕНА**



**СПАСИБО ЗА
ВНИМАНИЕ :T**