

Студ. Д. С. Шелегова  
 Науч. рук. ассист. Е. В. Терешко  
 (кафедра высшей математики, БГТУ)

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ СКОРОСТИ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ

Мы пользуемся математикой, чтобы описать закономерности явлений вокруг нас. И если мы изучаем иностранные языки, чтобы иметь возможность общаться с любым человеком, то владение языком математики даст нам больше. Мы сможем вести диалог с природой.

Применение и важность математики будет показана на примере решения задач в химической кинетике – разделе физической химии, изучающей закономерности протекания химических реакций во времени, зависимости этих закономерностей от внешних условий, а также механизмы химических превращений.

Цель работы: проанализировать и выбрать задачи из химической кинетики, вывести формулы для их решения, продемонстрировать возможности математики в описании закономерностей химических процессов.

Для того, чтобы реакция произошла, должны встретиться и столкнуться две молекулы. Согласно основному постулату химической кинетики, называемому также законом действующих масс, скорость реакции пропорционально произведению текущих концентраций реагирующих веществ, возведенных в некоторые степени [1]:

$$\omega = kC_1^{n_1}C_2^{n_2} \dots C_i^{n_i},$$

где  $k$  – коэффициент пропорциональности, называемый константой скорости реакции,  $C_i$  – концентрация вещества,  $n_1, n_2 \dots n_i$  – порядок реакции, определяемый экспериментально.

Для элементарных реакций (те, что происходят в результате парного столкновения или распада одной частицы) порядок можно принять равным коэффициенту, стоящему перед веществом.

*Реакции первого порядка.* В общем виде реакции первого порядка можно записать  $A \rightarrow B$ . Тогда уравнение изменения исходной концентрации вещества  $A$  выглядит  $-\frac{dC_A}{dt} = kC_A$  [2].

Решим дифференциальное уравнение, проинтегрировав выражение в пределах от  $C_0$  до  $C_A$  и выразим ответ через  $C_A$ ,  $C_A = C_0 e^{-kt}$  [3].

*Реакции второго порядка.* Реакции второго порядка имеют два возможных варианта протекания:  $2A \rightarrow B$  и  $A + B \rightarrow D + E$ .

В первом случае уравнение скорости реакции выглядит  $-\frac{dC_A}{dt} = kC_A^2$ . Решив уравнение, получим  $C_A = \frac{C_0}{C_0kt+1}$ .

Во втором случае возможны 3 варианта:

а) концентрация вещества А равна концентрации В. Тогда мы можем записать уравнение в виде  $-\frac{dC_A}{dt} = kC_A^2$ , решение которого уже было рассмотрено выше.

б) концентрация одного из веществ значительно превосходит концентрацию второго:  $C_A \gg C_B$ . В данном случае изменением концентрации преобладающего вещества мы можем пренебречь, а саму концентрацию считать постоянной и внести в  $k$ . Тогда скорость будем считать по концентрации только одного вещества. Порядок таких реакций принято называть псевдопорядком.

$$-\frac{dC_A}{dt} = kC_A,$$

$$C_A = C_0 e^{-kt}.$$

в) Концентрации А и В различны.

$$-\frac{dC_A}{dt} = kC_A C_B.$$

Сократим количество неизвестных. Пусть  $x$  – текущая концентрация образовавшихся веществ. Тогда  $C_A = C_{OA} - x$ , а  $C_B = C_{OB} - x$ .

$$\int_0^x \frac{dx}{(C_{OA} - x)(C_{OB} - x)} = k \int_0^t dt.$$

Проинтегрируем левую часть методом неопределенных коэффициентов[3]:

$$\begin{aligned} \int_0^x \frac{dx}{(C_{OA} - x)(C_{OB} - x)} &= -\frac{1}{C_{OA} - C_{OB}} \int_0^x \frac{dx}{(C_{OA} - x)} + \\ &+ \frac{1}{C_{OA} - C_{OB}} \int_0^x \frac{dx}{(C_{OB} - x)} = \frac{1}{C_{OA} - C_{OB}} \left( -\ln \frac{C_{OA}}{C_{OA} - x} + \ln \frac{C_{OB}}{C_{OB} - x} \right) = \\ &= \frac{1}{C_{OA} - C_{OB}} \ln \frac{C_{OB}(C_{OA} - x)}{C_{OA}(C_{OB} - x)}. \end{aligned}$$

Тогда решение дифференциального уравнения примет вид:

$$C_A = C_{OA} - \frac{C_{OA}C_{OB}(e^{kt(C_{OA}+C_{OB})}-1)}{C_{OB}-C_{OA}e^{kt(C_{OA}-C_{OB})}},$$

$$C_B = C_{OB} - \frac{C_{OA}C_{OB}(e^{kt(C_{OA}+C_{OB})}-1)}{C_{OB}-C_{OA}e^{kt(C_{OA}-C_{OB})}}.$$

*Реакции третьего порядка.* Реакции вида  $3A \rightarrow E$  могут быть осуществимы в процессе перекombинации атомов и простых радика-

лов и описываются уравнением  $-\frac{dC_A}{dt} = kC_A^3$ .

Наиболее проблематичным случаем являются реакции, где концентрации веществ не одинаковы:  $-\frac{dC_A}{dt} = kC_A^2C_B$ . Примем  $C_A = C_{OA} - x$ , а  $C_B = C_{OB} - x$ . Тогда  $\int_0^x \frac{dx}{(C_{OA}-x)^2(C_{OB}-x)} = k \int_0^t dt$ .

Распишем левую часть в виде суммы простых дробей

$$\frac{1}{(C_{OA} - x)^2(C_{OB} - x)} = \frac{A}{(C_{OA} - x)} + \frac{B}{(C_{OA} - x)^2} + \frac{C}{(C_{OB} - x)};$$

$$A = \frac{1}{2C_{OA}C_{OB} - C_{OB}^2 - C_{OA}^2}, B = -\frac{1}{(C_{OA} - x) - (C_{OB} - x)}, C = \frac{1}{2C_{OA}C_{OB} - C_{OB}^2 - C_{OA}^2}.$$

После подстановки и преобразований получим:

$$\int_0^x \frac{dx}{(C_{OA} - x)^2(C_{OB} - x)} = \frac{1}{2C_{OA}C_{OB} - C_{OA}^2 - C_{OB}^2} \ln \frac{C_{OB}(C_{OA} - x)}{C_{OA}(C_{OB} - x)} - \frac{1}{C_{OA} - C_{OB}} \left( \frac{1}{C_{OA} - x} - \frac{1}{C_{OA}} \right).$$

Так как выражение концентрации из полученного выражения слишком громоздко, то приведено решение для расчета значения  $k$ .

$$k = \frac{1}{t} \left( \frac{1}{2C_{OA}C_{OB} - C_{OA}^2 - C_{OB}^2} \ln \frac{C_{OB}(C_{OA} - x)}{C_{OA}(C_{OB} - x)} - \frac{1}{C_{OA} - C_{OB}} \left( \frac{1}{C_{OA} - x} - \frac{1}{C_{OA}} \right) \right).$$

В ходе работы были выведены формулы, используя которые, можно находить концентрацию вещества в любой момент времени, что является важным в любых отраслях химической, фармакологической, пищевой промышленности.

## ЛИТЕРАТУРА

1. А. И. Клындюк, Физическая химия : учебное пособие для студентов учреждений высшего образования по химико-технологическим специальностям / А. И. Клындюк, Г. С. Петров, Е. А. Чижова. – Минск : БГТУ, 2013. - 299 с.

2. Семиохин И. А., Страхов Б. В., Осипов А. И. Кинетика химических реакций: Учеб. пособие. – М.: Изд-во МГУ 1995. – 351 с.

3. Высшая математика : учебное пособие для студентов высших учебных заведений по техническим специальностям : в 2 ч. Ч. 1 / В. М. Марченко [и др.]. – Минск : БГТУ, 2010. – 204 с.