

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИ ИЗУЧЕНИИ КИНЕТИКИ СЛОЖНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Власенко В.И., Мея А.С.

Научный руководитель – Дудкина Е.Н., к.х.н., доцент

Белорусский государственный университет пищевых и химических технологий  
г. Могилев, Республика Беларусь

В практикуме по физической и коллоидной химии первоочередной задачей является получение студентами устойчивых навыков в выполнении сложных физико-химических расчетов. Непосредственное получение экспериментальных данных зачастую практически невозможно даже в рамках классического аудиторного практикума из-за сложности необходимого оборудования и техники эксперимента. Однако, эти сложности в организации традиционного практикума оказались плюсами в организации различных способов компьютерного моделирования протекания реальных химических процессов, что может быть использовано в дистанционном варианте выполнения лабораторных работ. В данной работе приводится пример лабораторной работы по кинетике химических реакций, в которой рассматриваются сложные химические реакции, которые протекают обратимо:  $A \leftrightarrow B$ . В качестве программного обеспечения выбрана программа офиса Microsoft – Excel. Наш выбор объясняется простотой и доступностью для каждого студента данного программного продукта.

Кинетику таких реакций можно описать следующим уравнением [1]:

$$\frac{dx}{d\tau} = k_1(C_0(A) - x) - k_2(C_0(B) + x);$$

где  $C_0(A)$  и  $C_0(B)$  - начальные концентрации вещества А и вещества В соответственно,  $x$  – концентрация вещества А, превратившегося к моменту времени  $\tau$ .

Если использовать степень превращения на момент установления равновесия, то решение этого уравнения примет следующий вид:  $x = x_{\infty}(1 - \exp(-k_1 + k_2)\tau)$ .

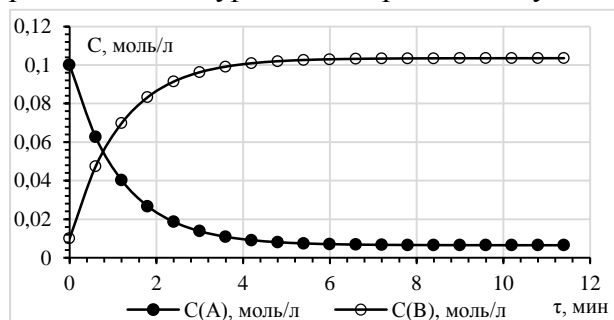


Рисунок 1 – Кинетические кривые для обратимых реакций

Представленные уравнения являются стартовыми, их дальнейшие математические преобразования позволяют рассчитать количества продуктов реакции на данный момент времени при заданных начальных концентрациях веществ и константах скорости  $k_1$  и  $k_2$ . Результаты расчетов представляются в виде графика (рисунок 1).

Данная лабораторная работа предполагает исследовательский подход к ее выполнению. Одна из поставленных задач – сделать вывод о факторах, которые влияют на скорость установления равновесия, выход продуктов и вид кинетических кривых.

### Список использованных источников

1. Основы физической химии. Теории и задачи: Учеб. пособие для вузов / В.В. Еремин, С.И. Каргов, И.А. Успенская, Н.Е. Кузьменко, В.В. Лунин. – М.: Издательство «Экзамен», 2005. – 480 с.