

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ МОДЕЛЬ ТРИМОЛЕКУЛЯРНОЙ РЕАКЦИИ.Тешаева Н¹Хотамова С¹¹ Учителя Зарафшанской профессиональной школы**ИНФОРМАЦИЯ О
СТАТЬЕ:****АННОТАЦИЯ:****ИСТОРИЯ СТАТЬИ:***Received: 01.11.2024**Revised: 02.11.2024**Accepted: 03.11.2024*

В статье представлены различные математические методы решения химических задач и их преимущества

**КЛЮЧЕВЫЕ
СЛОВА:**

дифференциальные уравнения, тримолекулярные реакции, кинетика, константа, молекула, концентрация, функция.

ВВЕДЕНИЕ. Математика является важным фактором в приобретении основ теоретических знаний и сложных вопросов химии. Основными понятиями химии, законов, теорий и примеров лабораторных работ, решения задач и упражнений являются теория и практика математики. Решение примеров и проблем в области химии играет важную роль в развитии у молодых людей способности самостоятельно мыслить, закреплять свои теоретические знания и понимание и применять эти знания на практике. Сопоставимая математика играет важную роль во всех областях образования и на протяжении всей жизни человека. Нет области, в которой мы можем представить математику.

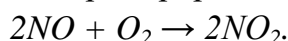
Изучение основ математики развивает такие качества, как усердие, настойчивость, чувство ответственности, самостоятельное и логическое мышление, воля и характер, а также достижение целей.

Дифференциальные уравнения служат одним из основных математических инструментов для построения моделей природных процессов. Уравнения химической кинетики (например, тримолекулярные реакции), стационарная диффузия, расчет потенциала ионной атмосферы и ее радиуса в теории Дебая — Хюккеля, уравнение Шредингера, теория рассеяния — далеко не полный перечень задач, сводящихся к решению дифференциальных уравнений либо систем дифференциальных уравнений. Таким образом, прикладное значение теории дифференциальных уравнений очень важно для расчёта тримолекулярной реакции в химической кинетики.

Тримолекулярная реакция

В зависимости от числа молекул (частиц), участвующих в элементарном химическом акте, различают молекулярности реакции. Встречаются моно-, би- и тримолекулярные реакции. Исследуем математическую модель тримолекулярной реакции, в каждом элементарном акте которой участвуют три молекулы или атома.

Например, рассмотрим реакцию окисления оксида азота в диоксид азота:



В результате взаимодействия двух молекул первого вещества и одной молекулы второго получаем две молекулы третьего вещества. Пусть $y_1(t) = [NO]$ — концентрация вещества NO в момент t , $y_2(t) = [O_2]$, тогда по закону действующих масс.

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dt} = -2ky_1^2y_2, \\ \frac{dy_2}{dt} = -ky_1^2y_2 \end{cases} \implies dy_1 = 2dy_2 \implies y_2 = \frac{y_1 - C}{2},$$

где k — константа скорости, константа C может быть найдена из заданных начальных условий, концентраций молекул оксида азота и кислорода; $C = y_1(0) - 2y_2(0)$. Найдем y_1 :

$$y_1' = -ky_1^2(y_1 - C) \implies \frac{-1}{y_1^2} \cdot \frac{dy_1}{dt} = k(y_1 - C) \implies$$

$$\implies d\left(\frac{1}{y_1}\right) = k\left(\frac{1}{1/y_1} - C\right) dt.$$

Обозначим $z = 1/y_1$, тогда $C \neq 0$ и

$$\frac{zdz}{1 - zC} = kdt \implies$$

$$kt = \int \frac{z dz}{1 - zC} = \frac{1}{C} \int \frac{Cz - 1 + 1}{1 - zC} dz =$$

$$= -\frac{z}{C} - \frac{1}{C^2} \ln(1 - Cz) + C_1 \implies$$

$$t(z) = \frac{C_1}{k} - \frac{z}{kC} - \frac{1}{kC^2} \ln(1 - Cz).$$

Константа C_1 находится из начального условия при подстановке $t = 0$ в полученное уравнение, т. е. $C_1 = \frac{z_0}{C} + \frac{1}{C^2} \ln(1 - Cz_0)$, где $z_0 = 1/y_1(0)$, а константа C определена ранее. Методами анализа несложно показать, что функция $t(z)$ монотонна при $z \in [1/y_1(0); 1/C)$, причем при $z \rightarrow 1/C+$, $t \rightarrow +\infty$, а при

$z \rightarrow 1/y_1(0)+$, $t \rightarrow 0+$. Таким образом, концентрация $y_1(t)$ монотонно убывает с ростом t с начального значения $y_1(0)$ до значения $C = y_1(0) - 2y_2(0)$ (рис. 1).

В случае, когда концентрации молекул оксида азота и кислорода связаны соотношением $2y_2(0) = y_1(0)$, т. е. $C = 0$, получаем

$$y_1' = -ky_1^3 \implies \frac{-1}{y_1^3} \cdot \frac{dy_1}{dt} = k \implies y_1^{-1} =$$

$$= 2kt + C_1 \iff y_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2kt + C_1}}.$$

Константу C_1 находим из начального условия, откуда $y_1(t) = \sqrt{\frac{1}{2kt + y_1^{-2}(0)}}$ (рис.2)

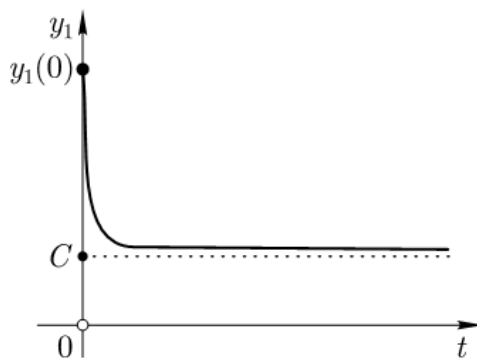


Рис.1

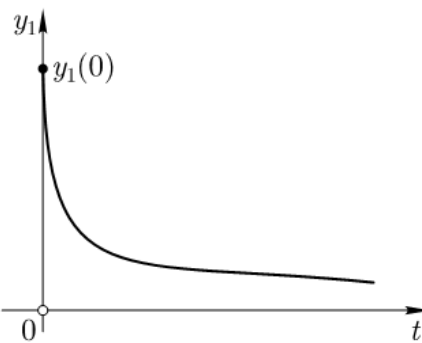


Рис.2

В заключение можно сказать, что при хороших математических познаниях можно успешно решать сложные химические задачи. Математика может использоваться для выполнения простых или сложных математических операций с химическими формулами и уравнениями химических реакций. В химии используется практически любой раздел математики.

Библиографический список:

1. Ерёмин В.В. Математика в химии. – М.: Математическое просвещение, 2012.
2. Усманова, Р. Н. Совершенствование методики решения задач по химии / Р. Н. Усманова. — Текст // Молодой ученый. — 2019. — № 52 с
3. А.И.Козко, Е.С.Соболева, А.В.Субботин. Математические методы решения химических задач: учеб. пособие для студ. Учреждений высш. проф. образования. «Академия», 2013.