

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ СЛОЖНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Радковский И.С., Лапцевич М.А.

Научные руководители – Дудкина Е.Н., к.х.н., доцент,

Брановицкая Н.В., ст. преп.

Могилевский государственный университет продовольствия
г. Могилев, Республика Беларусь

Изучение скорости протекания химических реакций в технологическом процессе является неотъемлемой задачей его исследования. Большинство процессов сопровождается сложными химическими превращениями. Расчет кинетических зависимостей таких процессов невозможен без привлечения компьютерных технологий. Кроме того, программирование такого процесса позволяет практически мгновенно моделировать его протекание при изменении условий его проведения.

В нашей работе была изучена возможность применения для моделирования таких процессов не специальных программ, а стандартного набора Microsoft Office и, в частности, математического оператора Excel, доступного каждому студенту. Предметом нашего изучения стали параллельные реакции.

В программу Excel были интегрированы уравнения кинетических зависимостей для простейшего случая параллельных реакций, являющихся необратимыми реакциями первого порядка. Были получены уравнения для расчета концентраций всех участников реакции на данный момент времени. Результат представляется в виде графической зависимости, пример которой представлен на рисунке 1.

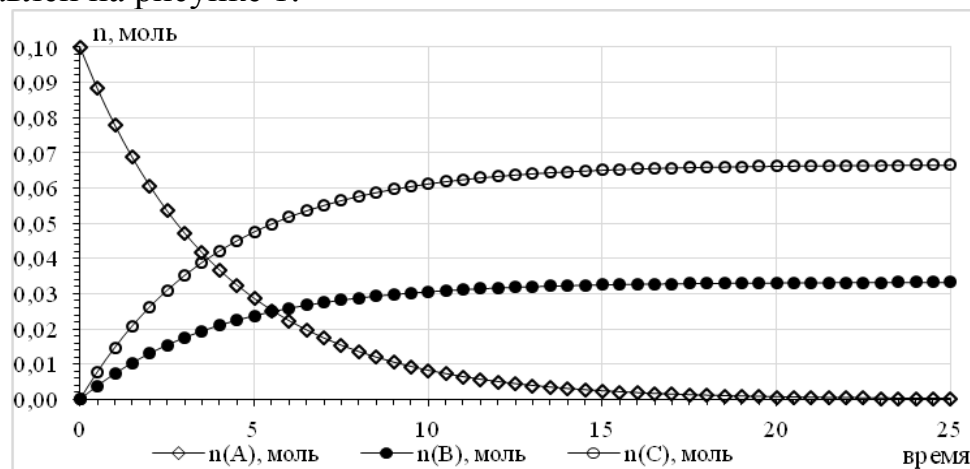


Рисунок 1 – Кинетические кривые для параллельных реакций