

УДК 517.926

ЗАСТОСУВАННЯ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ В ДОСЛІДЖЕННЯХ ХІМІЧНИХ РЕАКЦІЙ

Варвара Бойцун

Національний авіаційний університет, Київ

Науковий керівник – Руслана Горідько, ст.викладач

Ключові слова: диференціальні рівняння, хімія, математика в хімії, задача Коші, однорідне диференціальне рівняння.

Важко знайти розділ математики, який зовсім не використовується в хімії. Диференціальні рівняння, як фундаментальний інструмент в хімічній кінетиці, відіграють ключову роль у передбаченні динаміки хімічних реакцій та інших критичних аспектів сучасної хімії. Це забезпечує не лише теоретичне розуміння основних процесів хімії, але й надає можливість для передбачення та аналізу складних хімічних процесів.

Метою роботи є аналіз диференціальних рівнянь та їх застосування у вирішенні хімічної реакції величини.

Завдання на розрахунок складу рівноважної суміші. Виникають поліноміальні рівняння щодо частки перетворення вихідних речовин у продуктах. За основною теоремою алгебри поліном n -го степеня має рівно n коренів, серед яких можуть бути і комплексні. Однак у всіх рівняннях, що виникають в хімії, лише один корінь має хімічний сенс.

При розв'язанні хімічних задач, таких як, радіоактивний розпад, зміни концентрації розчину, реакції, що відбувається відповідно до стехіометричного рівняння типу $A \rightarrow B$ [1], слід знати, що швидкість зміни змінної величини пропорційна самому значенню цієї змінної, такі процеси є процесами першого порядку, їх можна описати таким рівнянням:

$\frac{dx}{dt} = kx$. У хімічній реакції величини, що входять до неї, означають x - кількість речовини в

одиниці об'єму, k - постійна величина при заданій температурі, t - час. Для хімічної реакції,

що складається з двох реакцій першого порядку $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$ за умови, що відомі сталі швидкості реакції $y_{A_0}, y_{B_0}, y_{C_0}$ визначимо концентрації y_B та y_C в певний момент часу. Нехай

y_A, y_B, y_C - відповідні концентрації речовини A, B, C . Рівняння швидкості реакції для

речовини A : $\frac{dy_A}{dt} = -k_1 y_A$ (1). Речовина B утворюється з речовини A , тому швидкість

утворення речовини B пропорційна концентрації A у певний момент часу t . Речовина B є

джерелом речовини C швидкість розпаду речовини B пропорційна її концентрації у певний

момент часу, процеси протікають одночасно, швидкість зміни кількості речовини B

визначається рівнянням $\frac{dy_B}{dt} = k_1 y_A - k_2 y_B$ (2) [2]. Для швидкості утворення речовини С

визначають концентрацію y_B за рівнянням $\frac{dy_C}{dt} = k_2 y_B$ (3). Рівняння (1) - диференціальне

рівняння з відокремлюваними змінними, його розв'язок є: $y_A = y_{A_0} e^{-k_1 t}$ (4). Якщо підставимо

(4) у рівняння (2), то отримаємо лінійне диференціальне рівняння першого порядку: $\frac{dy_B}{dt} + k_2 y_B = k_1 y_{A_0} e^{-k_1 t}$. Використовуючи метод Бернуллі, отримаємо шукану

концентрацію $y_B = \frac{k_1 y_{A_0}}{k_2 - k_1} e^{-(k_1 - k_2)t} e^{k_2 t} + C e^{-k_2 t}$. Розв'язавши задачу Коші, в момент часу $t=0$

концентрація була рівна y_{B_0} , отримаємо $C = y_{B_0} - \frac{k_1 y_{A_0}}{k_2 - k_1}$, тому маємо

$y_B = y_{B_0} e^{-k_2 t} + \frac{k_1 y_{A_0}}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t})$. Щоб знайти y_C запишемо рівняння матеріального балансу:

$y_{A_0} + y_{B_0} + y_{C_0} = y_A + y_B + y_C$. Звідси $y_C = y_{A_0} + y_{B_0} + y_{C_0} - y_{A_0} e^{-k_1 t} - y_{B_0} e^{-k_2 t} - \frac{k_1 y_{A_0}}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t})$.

Висновок

У сфері хімічної технології, диференціальні рівняння розглядаються як невід'ємний інструмент для аналізу та моделювання широкого спектра хімічних процесів, різноманітність застосувань диференціальних рівнянь, включаючи лінійні однорідні рівняння першого порядку, підкреслює їх універсальність у розв'язанні задач. Таке застосування не тільки демонструє тісний зв'язок між математикою та хімією, але й сприяє розвитку нових методологій та покращенню розуміння фундаментальних хімічних процесів.

Список використаних джерел:

1. Пріщенко О. П., Черногор Т. Т. Вісник Національного Технічного Університету «ХПІ». Харків, 2018. № 40. С. 39-45.
2. Парасюк І. О., Перестюк М. О. Локальний аналіз нелінійних диференціальних рівнянь. К.; П.: Аксиома, 2013.