

КИНЕТИКА ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ

Р. В. Буранов

Научный руководитель – А. Е. Павлов

ФГБОУ ВО «Российский государственный аграрный университет – МСХА имени К. А. Тимирязева», г. Москва, Российская Федерация

Аннотация. Кинетика химической реакции изучает скорость изменения концентрации реагентов и продуктов во времени. Основными параметрами, характеризующими кинетику реакции, являются скорость реакции, постоянная скорости реакции и порядок реакции. Скорость реакции определяется как изменение концентрации реагентов или продуктов за единицу времени. Постоянная скорости реакции зависит от температуры, концентрации реагентов и катализаторов. Порядок реакции показывает зависимость скорости реакции от концентраций реагентов. Изучение кинетики химических реакций позволяет предсказать ход реакции, оптимизировать условия и увеличить выход продукта.

Ключевые слова: кинетика химической реакции; химия; карбид хрома; пресс-формы; детали машин; карбиды; оксиды.

CHEMICAL REACTION KINETICS

R. V. Buranov

Scientific advisor – A. E. Pavlov

Russian State Agrarian University – Moscow Timiryazev Agricultural Academy, Moscow, Russian Federation

Abstract. Chemical reaction kinetics studies the rate of change of concentration of reactants and products in time. The main parameters characterizing reaction kinetics are reaction rate, reaction rate constant and reaction order. The reaction rate is defined as the change in the concentration of reactants or products per unit time. The reaction rate constant depends on temperature, concentration of reactants and catalysts. Reaction order shows the dependence of reaction rate on the concentrations of reactants. The study of chemical reaction kinetics allows predicting the course of reaction, optimizing conditions and increasing product yield.

Keywords: chemical reaction kinetics; chromium carbide; chromium carbide; molds; machine parts; carbides; oxides.

Методу газофазной химической металлизации (CVD—Chemical Vapor Deposition) уделяется в последнее время значительное внимание [1]. Задача состоит в разложении металлоорганического соединения на составные части. Практически все металлоорганические соединения склонны к процессам термической диссоциации. Они легко распадаются, выделяя металлы, карбиды, оксиды и другие материалы. При разложении паров можно формировать матрицы, пресс-формы, детали машин. В диссертации [2] с использованием термодинамического потенциала Гиббса дана оценка возможности протекания химической реакции.

Целью настоящего исследования является теоретическое изучение кинетики образования карбида хрома. В результате разложения паров гексакарбонила хрома образуются молекулы хрома и угарного газа [1], что показано в приведённой ниже формуле:



В дальнейшем хром (Cr) и угарный газ (CO) взаимодействуют с образованием карбида хрома. Стехиометрическое уравнение взаимодействия представляется в следующем виде:



Основываясь на *кинетическом законе действующих масс* [3], можно составить систему дифференциальных уравнений химической кинетики:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[\text{Cr}] &= -4k[\text{Cr}]^4[\text{CO}]^2, \\ \frac{d}{dt}[\text{CO}] &= -2k[\text{Cr}]^4[\text{CO}]^2, \\ \frac{d}{dt}[\text{CrO}_2] &= k[\text{Cr}]^4[\text{CO}]^2, \\ \frac{d}{dt}[\text{Cr}_3\text{C}_2] &= k[\text{Cr}]^4[\text{CO}]^2. \end{aligned}$$

Скорость химической реакции (v) пропорциональна произведению концентраций реагирующих веществ, возведённых в соответствующие степени. Для простых химических реакций порядки реакций равны стехиометрическим коэффициентам. При этом константа скорости химической реакции (k) не зависит от концентрации участников химической реакции. Скорость химической реакции равна:

$$v = -\frac{1}{4} \frac{d}{dt} [\text{Cr}] = -\frac{1}{2} \frac{d}{dt} [\text{CO}] = \frac{d}{dt} [\text{CrO}_2] = \frac{d}{dt} [\text{Cr}_3\text{C}_2],$$

$$v = k[\text{Cr}]^4 [\text{CO}]^2. \quad (3)$$

Начальные концентрации реагентов равны, соответственно:

$$[\text{Cr}]_0 = a, [\text{CO}]_0 = b, [\text{CrO}_2]_0 = y, [\text{Cr}_3\text{C}_2]_0 = 0.$$

Чтобы получить аналитические выражения для концентрации реагентов следует решить данную систему дифференциальных уравнений. В теоретической механике такая проблема называется задачей Коши [4-7]. Систему уравнений удаётся проинтегрировать аналитически. Приведём здесь решение, полученное для концентрации угарного газа:

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\left(\frac{a}{2} - b\right)^4} \frac{1}{[\text{CO}]} - \frac{3}{\left(\frac{a}{2} - b\right)^4} \frac{1}{\left(\frac{a}{2} - b + [\text{CO}]\right)} \\ & -\frac{1}{\left(\frac{a}{2} - b\right)^3} \frac{1}{\left(\frac{a}{2} - b + [\text{CO}]\right)^2} \\ & -\frac{1}{3\left(\frac{a}{2} - b\right)^2} \frac{1}{\left(\frac{a}{2} - b + [\text{CO}]\right)^3} \\ & + \frac{4}{\left(\frac{a}{2} - b\right)^5} \ln \left(\frac{\frac{a}{2} - b + [\text{CO}]}{[\text{CO}]} \right) + \frac{1}{\left(\frac{a}{2} - b\right)^4} \frac{1}{b} + \frac{3}{\left(\frac{a}{2} - b\right)^4} \frac{2}{a} \\ & + \frac{1}{\left(\frac{a}{2} - b\right)^3} \frac{4}{a^2} + \frac{1}{3\left(\frac{a}{2} - b\right)^2} \frac{8}{a^3} \\ & - \frac{4}{\left(\frac{a}{2} - b\right)^5} \ln \left(\frac{a}{2b} \right) = -32kt \end{aligned}$$

Аналитическая формула представляет зависимость концентрации угарного газа в виде неявной функций времени $t = t([\text{CO}])$.

Зависимости концентраций остальных реагентов находятся аналогично. Подбрав из экспериментов конкретные значения параметров, можно построить семейство кинетических кривых – зависимость концентраций участников реакций от времени.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Сыркин, В. Г. CVD-метод. Химическая парофазная металлизация / В. Г. Сыркин. – М. : Наука, 2000. – 496 с.
2. Логачев, К. М. Разработка технологии восстановления распылителей форсунок автотракторных дизелей термическим разложением соединений гексакарбонила хрома : диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук / Логачев Константин Михайлович, 2023. – 216 с.
3. Пригожин, И. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур / И. Пригожин, Д. Кондепуди. – М. : Мир, 2002. – 461с.
4. Павлов, А. Е. Плоскопараллельное качение эллипсоида по плоскости и цилиндру / А. Е. Павлов // Проблемы механики управления: Нелинейные динамические системы. – 2004. – № 36. – С. 94-118.
5. Павлов, А. Е. Динамика твёрдого тела эллипсоидной формы / А. Е. Павлов, Ю. И. Сунцов. – Ижевск : Ижевская ГСХА. – 2004.
6. Павлов, А. Е. Конспект лекций по теоретической механике / А. Е. Павлов, Л. А. Павлова. – Ижевск : Ижевская ГСХА. – 2006.
7. Павлов, А. Е. Эллиптические функции в задачах теоретической механики / А. Е. Павлов, Л. А. Павлова. – Ижевск : Ижевская ГСХА. – 2007.

Об авторах:

Буранов Роман Вадимович, студент ФГБОУ ВО «Российский государственный аграрный университет – МСХА имени К. А. Тимирязева» (127434, Российская Федерация, Москва, ул. Тимирязевская, д. 49), buranov.roman2015@gmail.com.

Научный руководитель – Павлов Александр Егорович, доцент кафедры сопротивления материалов и деталей машин ФГБОУ ВО «Российский государственный аграрный университет – МСХА имени К. А. Тимирязева» (127434, Российская Федерация, Москва, ул. Тимирязевская, д. 49), доктор физико-математических наук, alexpavlov60@mail.ru.

About the authors:

Roman V. Buranov, student, Russian State Agrarian University – Moscow Timiryazev Agricultural Academy (127434, Russian Federation, Moscow, Timiryazevskaya St., 49), buranov.roman2015@gmail.com.

Scientific advisor – Aleksandr E. Pavlov, associate professor of the Department of Resistance of Materials and Machine Parts, Russian State Agrarian University – Moscow Timiryazev Agricultural Academy (127434, Russian Federation, Moscow, Timiryazevskaya St., 49), D.Sc. (Physical and Mathematical), alexpavlov60@mail.ru.