

MODELAREA MATEMATICĂ A REACȚIILOR CHIMICE DE COMBINARE

Dorin AFANAS, UST (Chișinău), dorinafanas@rambler.ru

Lidia CALMUȚCHII, UST (Chișinău)

Rezumat: În articol este propusă o modalitate de soluționare a următoarei probleme: Două substanțe chimice lichide A și B cu volumele v și V , respectiv (măsurate în litri), formează în rezultatul unei reacții chimice o substanță chimică lichidă nouă C. Considerând că temperatura în timpul reacției chimice este constantă, iar din m volume ale substanței A și n volume ale substanței B se formează $(m + n)$ volume ale substanței C (cu condiția că raportul $m : n$ este dat), determinați cantitatea de substanță C în momentul arbitrar de timp t (măsurat în ore), dacă în decurs de T ore s-au format W volume de substanță C.

Cuvinte-cheie: modelare, reacție chimică, ecuație diferențială.

Abstract: Our scope is to solve the following problem: two liquid chemicals A and B with volumes v and V respectively, (measured in liters) in the result of a chemical reaction create a new liquid chemical C. Considering that during the chemical reaction the temperature is constant and each m volumes of the substance A and n volumes of the substance B form $(m + n)$ volumes of the substance C (with the condition that $m:n$ is given), determine the volume of the substance C at the arbitrary time t (measured in hours), if during time T , W volumes of the substance C were formed.

Keywords: modeling, chemical reaction, differential equation.

1. Noțiuni de model și modelare

Modelele matematice au un rol deosebit de important în cercetările științifice moderne. Materialul de construcție al acestor modele îl constituie noțiunile și simbolurile matematice. Practic, fiecare noțiune matematică, fiecare obiect matematic, pornind de la noțiunea de număr, este un model matematic.

La constituirea modelului matematic se scot în evidență acele caracteristici ale obiectului modelării care, pe de o parte, sunt informative, pe de altă parte, admit formalizarea matematică.

Formalizarea presupune posibilitatea de a pune în corespondență caracteristicile originalului și noțiunile matematice adecvate. În această ipoteză, legăturile depistate și cele ipotetice ale obiectului de studiu pot fi descrise cu ajutorul relațiilor matematice: ecuații, inecuații etc. În urma formalizării matematice se obține un model matematic.

Există numeroase definiții și clasificări ale modelelor. Termenul, provenind de la rădăcina latină "modus", care, printre alte semnificații, înseamnă și "mijloc", a fost folosit pentru prima dată de către matematicianul Beltrami în 1868 (modelul euclidian pentru Geometria Neeuclidiană).

Definiția cea mai generală consideră modelul ca o reprezentare simplificată (materială sau simbolică) a realității obiective (uneori a unei teorii abstracte), care se subordonează scopului cercetării. Definiția cea mai evoluată, din punctul de vedere al formalizării, include în categoria de model numai reprezentările prin relații matematice.

Modelul este un obiect sau un dispozitiv creat artificial de om care seamănă într-o anumită măsură cu altul (acesta din urmă fiind un obiect de cercetare sau de interes practic).

Noțiunea de model se referă la un mod de cunoaștere a realității, care constă în reprezentarea fenomenului studiat cu ajutorul unui sistem construit artificial.

Proprietatea cea mai generală a unui model constă în capacitatea de a reflecta, de a reproduce lucruri și fenomene ale lumii reale, ordinea lor necesară și structura lor.

Noțiunea de model rezultă din existența unei asemănări (similitudini) între două obiecte: unul considerat originalul, celălalt – modelul său.

Noțiunea de model este o noțiune metodologică generală. Prin model se înțelege construcția reală sau imaginară a oricărui obiect, fenomen, proces, care reflectă trăsăturile esențiale ale obiectului cercetat, iar modelul matematic reprezintă un sistem de relații matematice, care descriu proprietățile esențiale ale originalului. Procesul de dezvoltare a unui model matematic este numit proces de modelare matematică.

2. Noțiuni din chimia neorganică

Reacțiile chimice sunt interacțiuni dintre substanțe produse la nivel molecular. **Reactanți** se numesc substanțele care reacționează între ele, iar substanțele rezultate în urma reacției se numesc **produși de reacție**. **Ecuatia chimică** este o metodă de scriere a trăsăturilor esențiale ale unei reacții chimice, folosind simboluri chimice sau alte abrevieri recunoscute. Ea ne indică cum în procesul reacționării unor substanțe se obține o altă substanță. Prin convenție, reactanții (prezenți la început) sunt trecuți la stânga, iar produșii (prezenți la sfârșit) sunt trecuți la dreapta. O singură săgeată între ei indică o reacție ireversibilă, o săgeată dublă indică o reacție reversibilă. Legea conservării materiei necesită ca fiecare atom din partea stângă să apară în partea dreaptă (ecuația trebuie să fie echilibrată): numai dispunerea și combinațiile acestora se modifică.

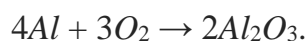
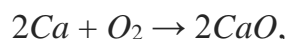
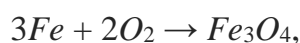
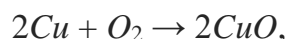
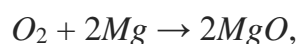
Există diferite tipuri de ecuații chimice: *reacții de combinare* — doi sau mai mulți reactanți se unesc pentru a forma un singur produs de reacție; *reacții de descompunere* — dintr-o substanță compusă (reactant) se formează doi sau mai mulți produși de reacție; *reacții de substituție* — atomul unui element înlocuiește atomii unui alt element într-o substanță compusă; *reacții de schimb* — două substanțe compuse își schimbă între ele unele elemente.

În prezenta lucrare sunt cercetate numai reacțiile de combinare, care se mai numesc și **reacții de sinteză**. Importanța reacției de combinare constă în obținerea unor substanțe chimice esențiale pentru industrie și viața de toate zilele, conform exemplurilor de mai jos:

- Sinteza acidului clorhidric: $H_2 + Cl_2 = 2HCl$
- Sinteza amoniacului: $N_2 + 3H_2 = 2NH_3$
- Stingerea varului: $CaO + H_2O = Ca(OH)_2$

Reacția cu nemetale: $S + O_2 \rightarrow SO_2$

Reacția cu unele metale:



Formula generală a reacției de combinare poate fi scrisă sub forma:



unde A, B, C, \dots reprezintă moleculele reactanților, M reprezintă molecula produsului de reacție, constantele a, b, c, \dots , care sunt niște numere naturale, indică numărul moleculelor reactanților, iar numărul natural m indică numărul moleculelor produsului de reacție.

De exemplu, ecuația chimică $2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O$ indică faptul că în rezultatul reacției a două molecule de hidrogen și a unei molecule de oxigen se obțin două molecule de apă.

Viteza cu care se formează o substanță nouă se numește **viteza reacției**. Concentrația substanțelor reactante se măsoară în moli (cantitatea de substanță a unui sistem care conține atâtea entități elementare câți atomi există în 0,012kg de C_{12}).

Una din legile fundamentale ale teoriei vitezelor reacțiilor chimice afirmă că *viteza reacției chimice, efectuate la o temperatură constantă, este proporțională cu produsul concentrației substanțelor care reacționează în momentul de timp dat.*

3. Modelarea unei reacții chimice de combinare

Ne punem scopul să rezolvăm următoarea problemă: *două substanțe chimice lichide A și B cu volumele v și V respectiv (măsurate în litri) chimice formează în rezultatul unei reacții o substanță chimică lichidă nouă C. Considerând că temperatura în timpul reacției chimice este constantă, iar din fiecare m volume ale substanței A și n volume ale substanței B se formează $(m + n)$ volume ale substanței C (cu condiția că raportul $m : n$ este dat), determinați cantitatea de substanță C în momentul arbitrar de timp t (măsurat în ore), dacă în decurs de T ore s-a format W volume de substanță C.*

Rezolvare. Notăm cu x volumul (măsurat în litri) al substanței C care s-a format în momentul arbitrar de timp t (măsurat în ore). Conform ipotezei avem că în acest moment

de timp t au reacționat $\frac{mx}{m+n}$ litri de substanță A și $\frac{nx}{m+n}$ litri de substanță B. Ultimul

rezultat indică faptul că în momentul de timp indicat au rămas $v - \frac{mx}{m+n}$ litri de substanță A

și $V - \frac{nx}{m+n}$ litri de substanță B. Astfel, conform legii fundamentale a teoriei vitezelor

reacțiilor chimice, obținem următoarea ecuație diferențială:

$$\frac{dx}{dt} = K \left(v - \frac{mx}{m+n} \right) \left(V - \frac{nx}{m+n} \right),$$

unde K este un coeficient de proporționalitate.

Ultima ecuație diferențială poate fi scrisă sub forma:

$$\frac{dx}{dt} = k((m+n)v - mx)((m+n)V - nx),$$

unde $k = \frac{K}{(m+n)^2}$.

În momentul inițial de timp $t = 0$ substanța C nu era, de aceea putem considera că pentru acest moment de timp $x = 0$. Conform ipotezei, în momentul de timp $t = T$ vom avea $x = W$.

Prin urmare, rezolvarea problemei inițiale se reduce la rezolvarea următoarei ecuații:

$$\frac{dx}{dt} = k((m+n)v - mx)((m+n)V - nx), \text{ unde } x(0) = 0, x(T) = W.$$

Integrăm ultima ecuație:

$$\int \frac{dx}{((m+n)v - mx)((m+n)V - nx)} = k \int dt.$$

Deoarece

$$\frac{1}{((m+n)v - mx)((m+n)V - nx)} = \frac{1}{(m+n)(mV - nv)} \left(\frac{m}{(m+n)v - mx} - \frac{n}{(m+n)V - nx} \right),$$

vom avea că

$$\begin{aligned} \int \frac{dx}{((m+n)v - mx)((m+n)V - nx)} &= \frac{1}{(m+n)(mV - nv)} \left(\int \frac{m dx}{(m+n)v - mx} - \int \frac{n dx}{(m+n)V - nx} \right) = \\ &= \frac{1}{(m+n)(mV - nv)} \left(\int \frac{d((m+n)V - nx)}{(m+n)V - nx} - \int \frac{d((m+n)v - mx)}{(m+n)v - mx} \right) = \\ &= \frac{1}{(m+n)(mV - nv)} \cdot \ln \frac{(m+n)V - nx}{(m+n)v - mx}. \end{aligned}$$

Astfel, vom obține:

$$\ln \frac{(m+n)V - nx}{(m+n)v - mx} = (m+n)(mV - nv)kt + \ln \alpha,$$

unde α este o constantă reală pozitivă.

Din ultima ecuație rezultă că

$$\frac{(m+n)V - nx}{(m+n)v - mx} = \alpha e^{(m+n)(mV - nv)kt}.$$

Pentru a determina valoarea constantei α utilizăm condițiile inițiale $x(0) = 0$:

$$\frac{(m+n)V - n \cdot 0}{(m+n)v - m \cdot 0} = \alpha e^{(m+n)(mV - nv)k \cdot 0}, \text{ de unde } \alpha = \frac{V}{v}.$$

În consecință, obținem relația: $\frac{(m+n)V - nx}{(m+n)v - mx} = \frac{V}{v} \cdot e^{(m+n)(mV - nv)kt}.$

Substituim $t = T$ și $x = W$ în ultima ecuație:

$$\frac{(m+n)V - nW}{(m+n)v - mW} = \frac{V}{v} \cdot e^{(m+n)(mV - nv)kT},$$

de unde $e^{(m+n)(mV - nv)kT} = \frac{v}{V} \cdot \frac{(m+n)V - nW}{(m+n)v - mW}.$ Deci

$$\frac{(m+n)V - nx}{(m+n)v - mx} = \frac{V}{v} \cdot e^{(m+n)(mV - nv)kt} = \frac{V}{v} \cdot \left(e^{(m+n)(mV - nv)kT} \right)^{\frac{t}{T}} = \frac{V}{v} \cdot \left(\frac{v}{V} \cdot \frac{(m+n)V - nW}{(m+n)v - mW} \right)^{\frac{t}{T}}.$$

Prin urmare, obținem dependența:

$$x = \frac{(m+n) \left(\left(\frac{v}{V} \cdot \frac{(m+n)V - nW}{(m+n)v - mW} \right)^{\frac{t}{T}} - 1 \right) \cdot v}{m \cdot \left(\frac{v}{V} \cdot \frac{(m+n)V - nW}{(m+n)v - mW} \right)^{\frac{t}{T}} - n}$$

Ultima relație este cea care determină cantitatea de substanță C obținută în rezultatul reacției chimice în momentul de timp t .

Menționăm că din considerente practice relația

$$n = m \cdot \left(\frac{v}{V} \cdot \frac{(m+n)V - nW}{(m+n)v - mW} \right)^{\frac{t}{T}}$$

nu poate avea loc, deoarece din volumele finite v și V ale substanțelor A și B respectiv, nu putem obține în rezultatul reacției chimice un volum infinit al substanței C .

BIBLIOGRAFIE

1. Амелькин В. В. *Дифференциальные уравнения в приложениях*. Москва: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1987, 160 стр.
2. Derrick W. R., Grossman S. I. *Elementary differential equations with applications*. – 2-nd ed. – Reading. Mass.: Addison-Wesley, 1981, 532 p.