

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

А. Ж. Курбанбаева

Доктор философий педагогических наук (Phd) Нукусского горного института

Навоийского государственного горно-технологического университета

Доктор философии педагогических наук (Phd) факультета «Естественные науки». Нукусский государственный педагогический институт.

kurbanbaevaasel1980@gmail.com

Е. Бегмуратова

Студентка 3 курса факультета «Естественные науки». Нукусский государственный педагогический институт

Аннотация:

Химическая кинетика изучает скорость химических реакций и факторы, влияющие на эту скорость. Температура, концентрация реагентов, давление и катализаторы являются основными факторами, влияющими на скорость реакции. Увеличение температуры обычно увеличивает скорость реакции, так как это способствует увеличению энергии частиц и частоте их столкновений. Экзотермические реакции обычно ускоряются при повышении температуры, в то время как эндотермические реакции ускоряются при снижении температуры. Концентрация реагентов также влияет на скорость реакции: увеличение концентрации реагентов обычно увеличивает скорость, так как это увеличивает частоту столкновений между частицами. Таким образом, химическая кинетика играет важную роль в понимании химических процессов и разработке новых методов синтеза и применения в различных областях науки и технологий.

Введение:

Химическая кинетика является важной областью химии, изучающей скорость химических реакций и механизмы, определяющие эту скорость. Понимание химической кинетики имеет большое значение для различных областей науки и технологии, так как позволяет предсказывать и контролировать ход химических процессов. В этом контексте, понимание влияния температуры, концентрации реагентов, давления и катализаторов на скорость реакции имеет

ключевое значение. Температура играет важную роль в химической кинетике, поскольку она влияет на энергию частиц и частоту их столкновений. Увеличение температуры обычно увеличивает скорость реакции, так как это способствует увеличению энергии частиц и частоте их столкновений. Концентрация реагентов также влияет на скорость реакции: увеличение концентрации реагентов обычно увеличивает скорость, так как это увеличивает частоту столкновений между частицами. Другими важными факторами, влияющими на химическую кинетику, являются давление и катализаторы. Повышение давления обычно увеличивает скорость реакции в газовой фазе за счет увеличения концентрации газовых молекул и частоты их столкновений. Катализаторы ускоряют химические реакции, снижая их активационную энергию. В данном контексте, изучение химической кинетики имеет большое значение для разработки новых методов синтеза материалов, улучшения производственных процессов и понимания механизмов химических реакций в различных системах.

Химическая термодинамика - раздел физической химии, изучающий скорость как протекания, так и обратимости реакций. Например, в реакции $N_2 + 3H_2 \rightleftharpoons 2NH_3$ скорость образования аммиака из азота и водорода (прямая реакция) равна скорости обратного превращения аммиака обратно в азот и водород (обратная реакция). Химическая термодинамика описывает равновесие реакции, когда обе реакции продолжают, но одна из них происходит в обратную сторону. Согласно этому определению, химическая термодинамика является частью физической химии, изучающей скорость протекания химических реакций. Основным показателем химической термодинамики является изменчивость среды (кислотное или щелочное состояние) и внешние условия (температура, давление), которые влияют на концентрацию элементов, участвующих в реакции. Изучение химической термодинамики имеет большое значение как для теоретических исследований, так и для решения различных практических задач.

Химическая термодинамика - это область, изучающая изменчивость концентрации реакционных компонентов и скорость химической реакции в зависимости от времени и точного изменения концентрации при постоянных внешних условиях. Эту химическую реакцию можно назвать "динамическим равновесием". В этой химической реакции, конечно, есть равновесие, но



элементы сохраняются и преобразуются в определенной концентрации. Реактивы и продукты связаны коэффициентами прямой связи, но они не всегда находятся в стабильном состоянии. Один и тот же элемент может участвовать в нескольких реакциях одновременно.

Сначала рассмотрим факторы, влияющие на скорость реакции: чистота элементов. Если чистота вещества считается фактором сохранения концентрации, то она рассматривается как имеющая скорость химической реакции равной 1 и связана с динамикой химической реакции. Например, свежая вода, обладающая высокой концентрацией, считается имеющей активность 1, и в реакции, где могут участвовать молекулы углерода монооксида и карбоната, возможно участие чистого углерода.

Факторы, влияющие на скорость реакции, включают в себя:

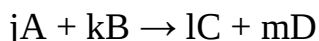
- Концентрация реагентов или продуктов, которая влияет на скорость реакции. Изменение концентрации реагента может привести к изменению скорости химической реакции, где концентрация реагента может быть важной. Если реагент добавлен, это может привести к увеличению скорости реакции.
- Изменение температуры, которое влияет на скорость реакции. Увеличение температуры может способствовать эндотермической реакции в химической термодинамике. Уменьшение температуры может изменить скорость реакции в соответствии с экзотермической реакцией.

Изменение давления влияет на скорость реакции. Например, увеличение объема газовой системы приводит к увеличению давления газовых молекул, а также их концентрации. Это может привести к увеличению скорости реакции газовой фазы. Химическая динамика сохраняет концентрацию вещества и изменяет их в соответствии с конкретными условиями. Это один из типов химической термодинамики. Химическая термодинамика описывает равновесие реакции, когда обе реакции продолжаются, но одна из них происходит в обратную сторону. Это один из типов химической термодинамики. Динамика реакции включает в себя изменение концентрации реагентов и продуктов в ходе продолжения реакции. Однако некоторые компоненты, такие как катализаторы, могут изменяться в обратную сторону. Это один из типов химической термодинамики.

Скорость реакции обычно описывается в терминах химической реакции, где концентрация реагентов и продуктов может быть описана динамически. В



жидкой и газовой фазе химических реакций скорость реакции описывается концентрацией веществ, так как концентрация воды и растворенных элементов изменяется. Для химической реакции:



Уравнение скорости реакции:

$$K = ([C]^l[D]^m) / ([A]^j[B]^k)$$

K определяет скорость реакции

[A],[B],[C],[D] и другие A, B, C, D и другие.

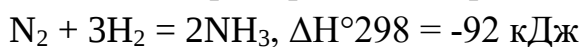
j, k, l, m и другие являются коэффициентами реакции.

В химической реакции скорость уменьшения концентрации реагентов связана с изменением концентрации реагентов. При такой ситуации скорость реакции связана с концентрацией исходных элементов. Эта связь описывает отношение между скоростью реакции, изменяющейся в соответствии с изменением концентрации, и скоростью реакции, изменяющейся во времени. При изменении концентрации система переходит в динамическое равновесие. В таком равновесии скорости реакций, направленных в разные стороны, становятся равными, и с течением времени количество каждого компонента делится между исходными элементами. Для таких систем действуют следующие особенности:

- Структура системы в динамике скорости реакции изменяется со временем;
- Если в конечном итоге скорость реакции увеличивается в результате обратного воздействия, она вернется к исходной структуре;
- Влияние факторов динамики скорости реакции может быть изменено в зависимости от конкретных обстоятельств.

Возвращение скорости реакции к исходному значению происходит по мере того, как элементы, вступающие в реакцию в начальный момент, участвуют в увеличении скорости реакции, а затем концентрация элементов, вступающих в реакцию, снижается, и скорость реакции уменьшается. Увеличение концентрации элементов обычно приводит к увеличению скорости обратной реакции. Этот процесс называется обратимой реакцией, где скорости реакций, проходящих в противоположных направлениях, становятся равными. В конечном итоге характеристикой равновесия является константа скорости реакции в равновесной системе. В системе скорость реакции изменяется в противоположную сторону при изменении какого-либо фактора

(температуры, давления или концентрации элементов), что является основой принципа Ле Шателье. При повышении температуры скорость реакции соответствует тепловому процессу эндотермической реакции, а при увеличении давления скорость реакции, при которой происходит увеличение количества элементов, участвующих в реакции, соответствует процессу экзотермической реакции. Это приводит к возможности успешного осуществления химических процессов при соблюдении принципа Ле Шателье. В качестве примера можно привести экзотермическую реакцию:



При повышении температуры скорость реакции увеличивается, что приводит к увеличению разложения аммиака на азот и водород. При понижении температуры (охлаждении системы) скорость реакции синтеза аммиака (обратная реакция) увеличивается. Таким образом, при увеличении температуры скорость реакции соответствует тепловому процессу эндотермической реакции, а при понижении температуры - процессу экзотермической реакции. Изменение давления также влияет на систему химической реакции. При увеличении давления количество молекул уменьшается, а количество элементов увеличивается. Таким образом, при переходе реакции в прямом направлении давление в системе уменьшается, а при обратной реакции давление увеличивается. Когда объем реакции уменьшается, скорость реакции увеличивается, и наоборот, при увеличении объема скорость реакции снижается.

Принцип Ле Шателье применим и к изменению концентрации, влияющему на скорость реакции. Если концентрация одного из исходных элементов увеличивается, скорость реакции в направлении образования этого элемента увеличивается, то есть увеличение концентрации реагента приводит к увеличению скорости реакции. Напротив, уменьшение концентрации добавляемого элемента приводит к уменьшению скорости реакции в направлении обратной реакции, и в данном случае скорость реакции будет уменьшаться.

Химическая кинетика является интересным и важным полем науки, взаимодействующим с физикой, биологией, математикой и другими научными дисциплинами. Ее влияние на эти области распространяется на множество аспектов, начиная от фундаментальных принципов химической кинетики,

которые могут быть применены и в других областях, и до более конкретных взаимосвязей между химическими процессами и физикой или биологией. Взаимодействие химической кинетики с физикой проявляется в том, что многие концепции и методы физики используются для изучения химических реакций. Например, принципы термодинамики помогают понять энергетические аспекты реакций. С другой стороны, взаимосвязь между химической кинетикой и биологией проявляется в области биохимии. Биохимия занимается изучением химических процессов в живых организмах. Принципы химической кинетики играют важную роль в понимании функций биологических систем и процессов, происходящих в них. Тема химической кинетики также связана с наукой о материалах. Взаимосвязь между химией и наукой о материалах проявляется в создании новых материалов, их свойствах и использовании. Принципы химической кинетики предоставляют информацию о материалах и их свойствах. Это имеет важное значение в разработке новых технологий и в области науки о материалах. Также химическая кинетика связана с математикой. Взаимосвязь между химией и математикой проявляется в моделировании и описании химических процессов. Химия использует математические модели для анализа данных. Эти формулы помогают в описании скорости химических реакций, молекулярной структуры, термодинамических свойств и других химических процессов.

Создание компьютерной программы.

Химическая кинетика, комплексная система взаимосвязей между химическими элементами и их химическими реакциями, является важной областью для физики, биологии, физики и других научных дисциплин. Принципы химической кинетики применяются в различных областях научных исследований, таких как химия, биология, физика и математика, что позволяет использовать их в других областях. В обучении химической кинетике метод создания компьютерных программ играет очень важную роль. Компьютерные программы обучения позволяют студентам использовать интерактивность и практические возможности при изучении химической кинетики.

Создание компьютерных программ обучения возможно с использованием различных методов:



1. Виртуальная лаборатория: этот метод позволяет студентам использовать виртуальные лаборатории для проведения химических экспериментов. В виртуальных лабораториях можно изучать структуру химических элементов и проводить анализ химических реакций. Этот метод позволяет студентам лучше понять теоретические концепции и применять их на практике в изучении химической кинетики.

2. Симуляция: использование программных симуляций в обучении химической кинетике имеет большое значение. Эти программы позволяют изучать структурные и физические свойства химических элементов, а также процессы химических реакций. С их помощью студенты могут изучать законы химической кинетики и использовать их.

3. Интерактивные уроки: высокий уровень интерактивности в компьютерных уроках позволяет студентам персонализировать свое обучение. Интерактивные уроки позволяют студентам изучать законы химической кинетики, проходить тесты и задания, а также применять полученные знания на практике. Этот метод помогает студентам лучше понять теоретические концепции и применять их на практике в изучении химической кинетики. Создание компьютерных программ обучения в области химической кинетики может быть осуществлено с использованием указанных методов, которые позволяют студентам получить интерактивность, практические возможности и повысить эффективность обучения химической кинетике.

Заключение:

Химическая кинетика играет ключевую роль в понимании химических процессов и их контроле. Изучение скорости реакций и факторов, влияющих на нее, позволяет улучшать производственные процессы, разрабатывать новые материалы и оптимизировать условия химических реакций. Важными факторами, влияющими на скорость реакции, являются температура, концентрация реагентов, давление и катализаторы. Понимание влияния этих факторов позволяет прогнозировать и контролировать химические процессы. Изучение химической кинетики имеет широкий спектр применений в различных областях, включая производство лекарств, разработку новых материалов, а также понимание биологических процессов. Поэтому, развитие

методов анализа и управления химическими реакциями остается актуальной задачей современной химии.

Используемая литература:

1. A.J. Kurbanbayeva. The educational value of surgical methods in maintaining health formed in the experiences of the Karakalpak people. Journal of Survey in Fisheries Sciences 10(2S) 3670-3676. 2023.
2. A.Dj.Kurbanbaeva. The educational value of traditions of teaching young people to maintain health in Karakalpak folk pedagogy. Eurasian journal of social sciences, philosophy and culture.
3. Курбанбаева Асель. Бегмуратова Еркинай. Интеграционные (интеративное) обучения в школе по химии// International bulletin of engineering and technology. Volume 3, Issue 7, July
4. И. Р. Аскеров, Ш. Х. Абдуллаев, О. Ш. Абдуллаев. "Руководство для поступающих в высшие учебные заведения". Ташкент: Илм-Зиё-Заковат, 2017, 150 с.
5. И. А. Ташев, И. И. Исмоилов, Р. Р. Розиев. "Сборник упражнений и задач по неорганической химии для учителей". Ташкент - 2005, 103 с.
6. В. В. Щербаков, Н. Н. Барботина, К. К. Власенко. "Общая химия. Сборник задач". Москва: Юрайт - 2019, с -100.
7. Asel Kurbanbaeva, Erkinay Begmuratova. Kimyoni myammoli-integrativ o'rganish ta'lim tizimi: tavsif va xususiyatlari. Центральноазиатский журнал образования и инноваций. 2023.