

# ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ.....	3
Глава 1. ФОРМАЛЬНО-КИНЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ОДНО- И ДВУХСТАДИЙНЫХ РЕАКЦИЙ.....	8
1.1. Основные понятия химической кинетики.....	8
1.2. Кинетика простых реакций.....	11
1.3. Реакции, включающие две элементарные стадии.....	19
1.3.1. Обратимые (двусторонние реакции).....	20
1.3.2. Последовательные реакции.....	25
1.3.3. Параллельные реакции.....	36
1.3.4. Простейшая автокаталитическая реакция.....	40
Глава 2. МНОГОСТАДИЙНЫЕ РЕАКЦИИ: СПОСОБЫ АНАЛИТИЧЕСКОГО РЕШЕНИЯ ПРЯМОЙ ЗАДАЧИ.....	43
2.1. Построение математической модели реакции.....	43
2.2. Классический матричный метод в прямой кинетической задаче.....	49
2.3. Преобразование Лапласа в кинетических расчетах.....	54
2.3.1. Краткие сведения из операционного исчисления.....	54
2.3.2. Вывод кинетических уравнений для линейных последовательностей реакций первого порядка.....	59
2.3.3. Переходный режим в системе проточных реакторов.....	64
2.3.4. Кинетические модели в виде уравнений с кусочно- непрерывными функциями.....	69
2.4. Приближенные методы химической кинетики.....	71
2.4.1. Метод квазистационарных концентраций.....	71
2.4.2. Квазиравновесное приближение. Кинетика ферментативных реакций.....	79
Глава 3. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ПРЯМОЙ ЗАДАЧИ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ.....	84
3.1. БЛОК GIVEN/ODESOLVE СИСТЕМЫ MATHCAD.....	84
3.2. ВСТРОЕННЫЕ ИНТЕГРАТОРЫ ПАКЕТА MATHCAD.....	89
3.3. КОМАНДЫ DSOLVE, ODEPLOT СИСТЕМЫ MAPLE В ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТАХ.....	97
3.4. МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ.....	100
3.5. НЕКОТОРЫЕ ВОПРОСЫ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ.....	120
Глава 4. ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ.....	132
4.1. ОСОБЕННОСТИ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ.....	132
4.2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ.....	134

4.2.1. Реакция гидролиза метилацетата в кислой среде .....	134
4.2.2. Димеризация бутадиена: определение порядка реакции и константы скорости .....	138
4.2.3. Исключение времени как независимой переменной. Термическое разложение циклобутанона .....	141
4.2.4. Линеаризация с численным интегрированием кинетических данных. Щелочное омыление диэфира адипиновой кислоты .....	142
4.2.5. Оценка доверительных интервалов определяемых констант .....	146
4.2.6. Кинетика изомеризации альфа-пинена .....	147
4.3. ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА И СПЕЦИАЛЬНЫЕ СПОСОБЫ МИНИМИЗАЦИИ .....	152
4.3.1. Определение параметров эмпирического уравнения для скорости синтеза фосгена .....	153
4.3.2. Кинетика изомеризации транс-стильбена .....	156
4.3.3. Кинетика последовательного замещения лигандов в комплексах хрома .....	158
4.4. ОПРЕДЕЛЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ .....	164
4.5. УНИВЕРСАЛЬНЫЕ ПОДХОДЫ К РЕШЕНИЮ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ .....	171
4.5.1. Обратимая реакция с димеризацией промежуточного продукта .....	171
4.5.2. Термическое разложение дисилана .....	177
Глава 5. ОСНОВЫ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ .....	183
5.1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ЭЛЕКТРОДНЫХ ПРОЦЕССОВ .....	183
5.2. КИНЕТИКА ЗАМЕДЛЕННОЙ СТАДИИ РАЗРЯДА-ИОНИЗАЦИИ .....	186
5.3. ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ С ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫМ ПЕРЕНОСОМ ЭЛЕКТРОНОВ .....	190
5.4. ЭЛЕКТРОДНЫЕ ПРОЦЕССЫ В УСЛОВИЯХ ЗАМЕДЛЕННОЙ СТАДИИ ДИФфуЗИИ .....	194
5.4.1. Связь между скоростью и потенциалом при стационарной диффузии .....	196
5.4.2. Нестационарная линейная диффузия к плоскому электроду при потенциостатическом замыкании цепи .....	198
5.4.3. Нестационарная диффузия к сферическому электроду при потенциостатическом замыкании .....	203
5.4.4. Нестационарная диффузия при гальваностатическом замыкании цепи .....	209
Глава 6. ИНТЕРФЕЙС ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫХ СРЕДСТВ МАТНСАД .....	213
6.1. Ввод/вывод информации .....	213
6.1.1. Операторы вывода результата расчета .....	213
6.1.2. Оператор ввода .....	220

6.1.3. Тандемы операторов интерфейса .....	229
6.1.4. Векторы и матрицы .....	235
6.1.5. Считывание данных из файла .....	240
6.1.6. Обмен данными между Mathcad-документами .....	241
6.1.7. Скрытие и защита операторов .....	242
6.2. ПЕРЕМЕННАЯ-ФУНКЦИЯ-ОПЕРАТОР .....	245
6.2.1. Функция и оператор .....	245
6.2.2. Имя переменной .....	255
6.2.3. Переменная-невидимка .....	259
6.3. КОММЕНТАРИИ В РАСЧЕТНЫХ ДОКУМЕНТАХ .....	268
6.4. РАБОТА С ФИЗИЧЕСКИМИ ВЕЛИЧИНАМИ: ПРОБЛЕМЫ И РЕШЕНИЯ .....	276
6.5. ОБЪЕМНОСТЬ РАСЧЕТНЫХ ДОКУМЕНТОВ .....	290
6.6. НАУЧНАЯ ГРАФИКА .....	292
6.7. MATHCAD APPLICATION/CALCULATION SERVER (MA/CS) .....	298
6.7.1. Подготовка Mathcad-документа к публикации в Интернет (от WorkSheet к WebSheet) .....	298
6.7.2. Web Controls – сетевые элементы интерфейса .....	300
6.7.3. Работа с физическими величинами на MA/CS .....	310
6.7.4. О комментариях в WebSheets .....	320
6.7.5. О вставках других программ и других ограничениях .....	325
6.7.6. Об именах переменных и функций .....	331
6.7.7. Проблема объемных исходных данных .....	333
6.7.8. Контроль знаний через MA/CS .....	334
6.7.9. Доступ к расчетам через пароль .....	337
Глава 7. ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ .....	340
ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ .....	375
СПИСОК РЕКОМЕНДОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ .....	377
ЛИТЕРАТУРА ПО ХИМИЧЕСКОЙ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКЕ .....	377
Учебники, монографии, статьи, сайты .....	377
Задачники .....	378
ЛИТЕРАТУРА ПО МАТЕМАТИЧЕСКИМ ПАКЕТАМ .....	379
ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА .....	380