Курс: «Застосування диференціальних рівнянь для розв'язання проблем природознавства» **ст. викл. Рего В. Л.**
До Модуля 1
Лекція №4:

Хімічні реакції. Радіоактивний розпад

Хімічне рівняння показує, яким чином у процесі взаємодії одних речовин утворюється інша речовина. Наприклад, рівняння

$$2H_2 + O_2 = 2H_2O$$

показує, що внаслідок взаємодії двох молекул водню і однієї молекули кисню утворюються дві молекули води.
Загалом хімічне рівняння записують у вигляді

$$\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2 + \ldots + \alpha_m A_m = \beta_1 B_1 + \beta_2 B_2 + \ldots + \beta_n B_n,$$

де A_i, $i = \overline{1,m}$ – молекули взаємодіючих речовин (реагентів); B_j, $j = \overline{1,n}$ – молекули речовин, отриманих унаслідок хімічної реакції (продуктів реакції); а сталі α_i, β_j – додатні цілі числа, що вказують на кількість молекул, які беруть участь у реакції.
Швидкість утворення нової речовини називається *швидкістю реакції*. *Діюча маса* або *концентрація* реагуючої речовини описується кількістю молів[1] цієї речовини в одиниці об'єму.
Одним із основних законів теорії швидкостей хімічних реакцій є ***закон діючих мас***, згідно з яким швидкість хімічної реакції за сталої температури прямо пропорційна добутку концентрацій речовин, що беруть участь у реакції в даний момент часу, тобто

$$\frac{dx(t)}{dt} = K \prod_{i=1}^{m} y_i(t), \tag{4.1}$$

де $x(t)$ – концентрація продукту реакції, $y_i(t)$, $i = \overline{1,m}$ – концентрації m реагентів у момент часу t, K – коефіцієнт пропорційності.

Приклад 4.1. Дві рідкі хімічні речовини A і B об'єму 10 і 20 літрів відповідно в процесі хімічної реакції утворюють нову рідку речовину C. Вважаючи температуру в процесі реакції незмінною, визначити кількість речовини C в довільний момент часу t, якщо відомо, що з кожних двох об'ємів речовини A і одного об'єму речовини B утворюється три об'єми речовини C, причому за 20 хв останньої утворилося 6 л.
Розв'язання. Нехай $x(t)$ – об'єм (у літрах) речовини C, яка утворилася на момент часу t (в годинах). Тоді з умов задачі випливає, що на цей момент часу в хімічну реакцію вступило $2x/3$ літрів речовини A і $x/3$ літрів речовини B, а отже, концентрації реагентів у цей момент рівні $y_A = 10 - \frac{2x}{3}$, $y_B = 20 - \frac{x}{3}$ літрів. Тому згідно з законом діючих мас (4.1) отримуємо диференціальне рівняння

$$\frac{dx}{dt} = K\left(10 - \frac{2x}{3}\right)\left(20 - \frac{x}{3}\right),$$

[1] 1 моль – кількість речовини, що містить $N_A = 6.022140857(74)\cdot 10^{23}$ структурних елементів (атомів, молекул, іонів тощо) речовини. Стала N_A називається *числом Авогадро*.

або

$$\frac{dx}{dt} = k(15 - x)(60 - x),$$

де k – коефіцієнт пропорційності ($k = 2K/9$). Оскільки в початковий момент часу речовини C ще не було, а через 20 хв її вже утворилося 6 л, то до рівняння слід додати дві крайові умови: $x(0) = 0$, $x(1/3) = 6$. Отже, вихідна задача звелася до розв'язування крайової задачі

$$\frac{dx}{dt} = k(15 - x)(60 - x), \quad x(0) = 0, \quad x(1/3) = 6.$$

Зінтегрувавши рівняння методом відокремлення змінних, із урахуванням умови $x(0) = 0$ одержимо:

$$(60 - x) = 4e^{45kt} \cdot (15 - x).$$

З останньої рівності, враховуючи другу крайову умову $x(1/3) = 6$, знаходимо $e^{15k} = 3/2$. А тоді

$$(60 - x) = 4(3/2)^{3t} \cdot (15 - x),$$

звідки шукана кількість утвореної на момент часу t речовини C визначається співвідношенням

$$x(t) = 15 \cdot \frac{1 - (2/3)^{3t}}{1 - 0{,}25 \cdot (2/3)^{3t}}.$$

З умови задачі зрозуміло, що внаслідок хімічної реакції може утворитися лише скінченна кількість речовини C. Отриманий розв'язок дозволяє переконатися в цьому математично, адже з нього випливає, що

$$\lim_{t \to \infty} x(t) = 15,$$

тобто речовини C може утворитися не більше 15 л. З іншого боку, це очевидний факт, адже для утворення 15 л речовини C згідно з умовою задачі необхідно 10 л речовини A і 5 л речовини B – тому після цього реакція припиниться у зв'язку з вичерпанням одного з реагентів, а саме речовини A.

Радіоактивність – явище спонтанного (самочинного) перетворення нестійкого ізотопу[2] хімічного елемента в інший ізотоп, зазвичай іншого елемента (*радіоактивний розпад*) шляхом випромінювання елементарних частинок[3]. Ці потоки частинок називають *ядерним випромінюванням*. Явище радіоактивності було відкрите в 1896 р. французьким ученим Антуаном Анрі Беккерелем (1852-1908).
При радіоактивному розпаді відбуваються перетворення ядер атомів. Енергії частинок, які при цьому утворюються, набагато більші за енергії, що виділяються в типових хімічних реакціях. Тому ці процеси практично не залежать від хімічного оточення атома (зовнішніх факторів), і сполук, у які цей атом входить. Радіоактивний розпад відбувається спонтанно, тобто неможливо визначити момент, коли розпадеться те чи

---

[2] Ізотопи – нукліди одного й того ж хімічного елемента, що мають різну кількість нейтронів, а отже, різну атомну масу (нукліди – загальна назва атомних ядер і атомів).

[3] Залежно від характеру цього випромінювання розрізняють наступні типи радіоактивного розпаду: а) α-розпад (розпад атомного ядра на ядро-продукт і α-частинку), б) β-розпад (перетворення нейтрона в протон із вильотом із ядра електрона і антинейтрино); в) γ-розпад (випромінювання γ-квантів, тобто електромагнітних хвиль із довжиною хвилі, меншою за розміри атома).

інше ядро. Однак для кожного типу розпаду є характерний час, протягом якого розпадається половина всіх радіоактивних ядер. Цей час називається *періодом напіврозпаду*. Для різних радіоактивних ізотопів період напіврозпаду може лежати в дуже широких межах – від нано-секунд (10^{-9} с) до мільйонів років. Ізотопи з малим періодом напіврозпаду дуже радіоактивні, але швидко зникають. Ізотопи з великим періодом напіврозпаду слабко радіоактивні, зате ця радіоактивність зберігається тривалий час.

Швидкість розпаду визначається кількістю радіоактивної речовини, що розпадається за одиницю часу. Нехай у момент часу t маса радіоактивної речовини була m, а в момент $t+\Delta t$ відповідно $m+\Delta m$, тобто за час Δt розпалася маса $-\Delta m$. Відношення $\Delta m/\Delta t$ є середньою швидкістю розпаду. Границя цього відношення при $\Delta t \to 0$

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta m}{\Delta t} = \frac{dm}{dt}$$

є швидкістю розпаду в момент часу t.

Диференціальні моделі задач, пов'язаних із радіоактивним розпадом, будуються на підставі ***закону радіоактивного розпаду***: швидкість розпаду радіоактивної речовини прямо пропорційна масі цієї речовини $m(t)$ в кожний заданий момент часу t. Для процесу з одним розпадом $A \to B$ (розпад нукліду A в інший нуклід B) згідно з цим законом отримуємо диференціальне рівняння

$$\frac{dm}{dt} = -\lambda m, \tag{4.2}$$

де $\lambda = const > 0$ – *стала розпаду*.

Дещо складніші моделі одержуються у випадку *ланцюгових розпадів*. Наприклад, за процесу з двома розпадами $A \to B \to C$ (нуклід A розпадається в нуклід B, а той у свою чергу – в нуклід C) для речовини A справедливе рівняння (4.2), зате для речовини B модель набуває складнішого вигляду:

$$\frac{dm_A}{dt} = -\lambda_A m_A, \quad \frac{dm_B}{dt} = -\lambda_B m_B + \lambda_A m_A.$$

За ланцюгового процесу з багатьма розпадами $A_1 \to A_2 \to \ldots \to A_N \to B$, де N кількість розпадів, аналогічно отримаємо наступну модель:

$$\frac{dm_i}{dt} = -\lambda_i m_i + \lambda_{i-1} m_{i-1}(0) e^{-\lambda_{i-1} t}, \quad i = \overline{1, N},$$

де $m_{i-1}(0)$ – початкова кількість речовини A_{i-1}. Загальний розв'язок для рекурсивної задачі дає *рівняння Бейтмана*:

$$m_N = \frac{m_1(0)}{\lambda_N} \sum_{i=1}^{N} \lambda_i c_i e^{-\lambda_i t}, \quad c_i = \prod_{j=1,\, j \neq i}^{N} \frac{\lambda_j}{\lambda_j - \lambda_i}.$$

Приклад 4.2. Знайти закон зміни маси радію в залежності від часу, якщо в початковий момент часу $t=0$ маса радію була m_0, а за 6 років розпалося 0,26% від початкової кількості.

Розв'язання. Нехай $m(t)$ – маса радію в довільний момент часу t. Тоді згідно з законом радіоактивного розпаду ця функція є розв'язком рівняння (4.2), яке інтегрується шляхом відокремлення змінних:

$$\frac{dm}{m} = -\lambda dt \quad \Rightarrow \quad m = C\,\mathrm{e}^{-\lambda t},$$

де C – стала інтегрування, значення якої визначаємо з початкової умови:

$$m(0) = m_0 \quad \Rightarrow \quad C = m_0 \quad \Rightarrow \quad m = m_0 e^{-\lambda t}.$$

Стала розпаду λ визначається зі спостережень наступним чином. Нехай за час t_0 розпадається α% від початкової маси радію. Тоді маємо

$$\left(1 - \tfrac{\alpha}{100}\right)m_0 = m_0 e^{-\lambda t_0} \quad \Rightarrow \quad \lambda = -\tfrac{1}{t_0}\ln\left(1 - \tfrac{\alpha}{100}\right).$$

Підклавши в останню формулу значення $t_0 = 6$, $\alpha = 0{,}26$ згідно з умовою задачі, одержимо $\lambda = 0{,}000436$. Отже, маса радію в довільний момент часу описується формулою

$$m = m_0\,\mathrm{e}^{-0{,}000436t},$$

тобто зміна кількості радіоактивної речовини відбувається за експоненціальним законом.

Зауважимо, що до рівняння вигляду (4.2) зводяться чимало різних задач фізики, хімії та інших наук.

Джерела:

Амелькин В.В. Дифференциальные уравнения в приложениях. – М.: «Наука», 1987. – С. 22-24.

Пискунов Н. С. Дифференциальное и интегральное исчисления для втузов. Т. 2. – М.: «Наука», 1970. – С. 26-27.