

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНА МЕТАЛУРГІЙНА АКАДЕМІЯ УКРАЇНИ
КАФЕДРА ТЕОРІЇ МЕТАЛУРГІЙНИХ ПРОЦЕСІВ І ХІМІЇ

Методичні вказівки до практичних занять
з дисципліни
ТЕОРІЯ МЕТАЛУРГІЙНИХ ПРОЦЕСІВ

Спеціальність: 136 - Металургія
Рівень освіти: Бакалавр (МЕ02)

Розробник: доц.

А.А. Надточій

Дніпро

Зміст

Практичне заняття № 1 (2 години): «Визначення термодинамічних властивостей багатокомпонентних металургійних розплавів»	3
Практичне заняття № 2 (4 години): «Визначення розподілу елементів між шлаком, металом та газовою фазою. Визначення розподілу елементів між шлаком і металом з використанням різних теорій (ТСІР, ТРІР, шлаку як фази з колективизированими електронами), а також з використанням діаграм активностей оксидів).....	5
Практичне заняття № 3 (2 години): «Вплив форми твердої речовини на визначення швидкості процесу. Визначення кінетичних рівнянь для зразків різної форми (плоский зразок (пластина), кулі, циліндра або дроту та куба)» ..	11

Практичне заняття № 1 (2 години): «Визначення термодинамічних властивостей багатокомпонентних металургійних розплавів»

Задача 1. Розплавлена сталь має склад, %: 0,40 C; 1,3 Cr; 4,5 Ni; 0,8 Mo. Розрахувати активність вуглецю в цьому розплаві при 1600 °С.

Розв'язання. Активність вуглецю по відношенню к 1 %-ному стандартному стану $a_{C(1\%)} = f_C[\%C]$.

Знаходимо коефіцієнт активності вуглецю в розплаві $\lg f_C = e_C^C[\%C] + e_C^{Cr}[\%Cr] + e_C^{Ni}[\%Ni] + e_C^{Mo}[\%Mo] = 0,14 \cdot 0,40 - 0,024 \cdot 1,3 + 0,012 \cdot 4,5 - 0,0083 \cdot 0,8 = 0,0722$;

$$f_C = 1,18; a_C = 1,18 \cdot 0,4 = 0,47.$$

Задача 2. Для розплаву Fe-C, що містить 0,3 % вуглецю, визначити коефіцієнт активності f_C при 1600 °С та розрахувати значення f_C при добавці в цій розплав 1 % легуючих елементів: V, Ni, Mn, Cu, Cr.

Розв'язання. Коефіцієнт активності вуглецю в бінарному розплаві Fe-C визначається $\lg f_C = e_C^C[\%C]$.

Для умов задачі $e_C^C = 0,14$, тоді $\lg f_C = e_C^C[\%C] = 0,14 \cdot 0,3 = 0,042$; $f_C = 1,10$.

Добавка легуючих елементів змінює коефіцієнт активності вуглецю. Для потрійної системи Fe-C-X $\lg f_C = e_C^C[\%C] + e_C^X[\%X]$.

Додавання 1 % ванадію, для якого $e_C^V = -0,077$ приводить до значення коефіцієнта активності вуглецю $\lg f_C = 0,14 \cdot 0,3 - 0,077 \cdot 1 = -0,035$; $f_C = 0,92$.

Таким чином, ванадій знижує активність розчиненого в залізі вуглецю. Аналогічно проводимо розрахунок для інших легуючих елементів:

$e_C^{Ni} = 0,012$; $f_C = 1,13$; $e_C^{Mn} = -0,012$; $f_C = 1,07$; $e_C^{Cu} = 0,016$; $f_C = 1,14$; $e_C^{Cr} = -0,024$; $f_C = 1,04$.

Результати розрахунку представлені на графіку рис. 1.

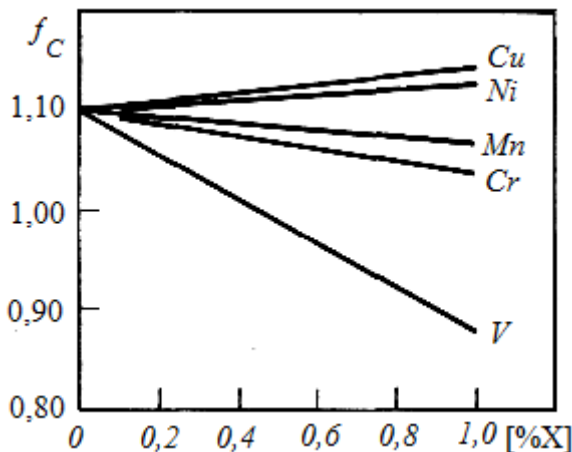


Рис. 1 – Вплив легуючих елементів на коефіцієнт активності вуглецю в рідкому залізі при 1600 °С ($[C]=0,3\%$)

Задача 3. За експериментальними даними для розплаву Ni-Si при температурі 1530 °С та концентрації кремнію $x_{Si} = 0,040$, коефіцієнт активності кремнію $\lg \gamma_{Si} = -4,00$. Значення коефіцієнта активності кремнію при його концентрації в рідкому нікелю $x_{Si} \rightarrow 0$ при тій же температурі $\lg \gamma_{Si}^0 = -4,31$. Визначити значення параметрів взаємодії ε_{Si}^{Si} та e_{Si}^{Si} для розбавлених розчинів кремнію в нікелю при 1530 °С.

Розв'язання. Відповідно до рівняння $\ln \gamma_{Si} = \ln \gamma_{Si}^0 + \varepsilon_{Si}^{Si} x_{Si}$. Звідки знаходимо

$$\varepsilon_{Si}^{Si} = \frac{\ln \gamma_{Si} - \ln \gamma_{Si}^0}{x_{Si}} = \frac{-4,0 - (-4,31)}{0,04} = 7,75.$$

Значення параметра e_{Si}^{Si} відповідно з рівнянням буде дорівнювати

$$e_{Si}^{Si} = \frac{M_{Ni}}{230,3 \cdot M_{Si}} \varepsilon_{Si}^{Si} = \frac{58,71}{230,3 \cdot 28,09} 7,75 = 0,07.$$

Практичне заняття № 2 (4 години): «Визначення розподілу елементів між шлаком, металом та газовою фазою. Визначення розподілу елементів між шлаком і металом з використанням різних теорій (ТСІР, ТРІР, шлаку як фази з колективизированими електронами), а також з використанням діаграм активностей оксидів)

Задача 1. Використовуючи основні положення теорії досконалого іонного розчину, розрахувати активності та коефіцієнти активності FeO, CaO та MnO у розплавленому шлаке складу, %: 38,5 CaO; 11,5 MgO; 8,6 MnO; 32,5 FeO; 6,5 Fe₂O₃; 2,4 SiO₂.

Розв'язання. Відповідно до теорії досконалого іонного розчину, розплавлений шлак складається з наступних іонів Ca²⁺, Mg²⁺, Mn²⁺, Fe²⁺, FeO₂⁻, SiO₄⁴⁻, O²⁻.

Визначаємо число молей компонентів у 100 г шлаку, результати розрахунку наведені нижче:

Компоненти шлаку	Молекулярна маса	% за масою	Число молей в 100 г шлаку
CaO	56,1	38,5	0,687
MgO	40,31	11,5	0,285
MnO	70,94	8,6	0,121
FeO	71,85	32,5	0,452
Fe ₂ O ₃	159,7	6,5	0,041
SiO ₂	60,09	2,4	0,040
$\sum n_i$			1,626

Визначаємо загальне число грам-іонів катіонів і аніонів в шлаку:

$$\sum n_i^+ = n_{CaO} + n_{MgO} + n_{MnO} + n_{FeO} = 0,687 + 0,285 + 0,121 + 0,452 = 1,545;$$

$$= 1,545 - 0,040 + 0,041 = 1,545.$$

$$\sum n_i^- = \sum n_i^+ - n_{SiO_2} + n_{Fe_2O_3} = 1,545 - 0,040 + 0,041 = 1,546.$$

Число грам-іонів аніонів кисню

$$n_{O^{2-}} = \sum n_i^+ - 2n_{SiO_2} - n_{Fe_2O_3} = 1,545 - 2 \cdot 0,040 - 0,041 = 1,424.$$

Знайдемо іонні частки катіонів і аніону кисню:

$$x_{Ca^{2+}} = \frac{n_{Ca^{2+}}}{\sum n^+} = \frac{n_{CaO}}{\sum n^+} = \frac{0,687}{1,545} = 0,445; \quad x_{Mg^{2+}} = \frac{0,285}{1,545} = 0,184;$$

$$x_{Mn^{2+}} = \frac{0,121}{1,545} = 0,078; \quad x_{Fe^{2+}} = \frac{0,452}{1,545} = 0,293; \quad x_{O^{2-}} = \frac{1,424}{1,546} = 0,921.$$

Активності компонентів шлакового розплаву будуть дорівнювати:

$$a_{FeO} = x_{Fe^{2+}} \cdot x_{O^{2-}} = 0,293 \cdot 0,921 = 0,270,$$

$$a_{CaO} = x_{Ca^{2+}} \cdot x_{O^{2-}} = 0,445 \cdot 0,921 = 0,410,$$

$$a_{MnO} = x_{Mn^{2+}} \cdot x_{O^{2-}} = 0,078 \cdot 0,921 = 0,072.$$

Коефіцієнти активності знаходимо як відношення активності компонента к його мольній долі $\gamma_i = a_i/x_i$:

$$\gamma_{FeO} = 0,270/0,278 = 0,97; \quad \gamma_{CaO} = 0,410/0,423 = 0,97; \quad \gamma_{MnO} = 0,072/0,074 = 0,97.$$

Задача 2. Розрахувати значення активностей MnO, FeO та P₂O₅ шлакового розплаву, що має склад, %: 15 FeO, 7 MnO, 28 CaO, 8 MgO, 21 SiO₂, 10,5 P₂O₅. Температура розплаву 1580°C. Розрахунок провести, використовуючи теорію регулярних іонних розчинів.

Розв'язання. Знаходимо число молей кожного компонента в 100 г шлаку:

n_{FeO}	n_{CaO}	n_{SiO_2}	n_{MnO}	n_{MgO}	$n_{P_2O_5}$
0,208	0,500	0,350	0,099	0,200	0,074

Сума грам-іонів усіх катіонів у 100 г шлаку

$$\sum n_i^+ = n_{FeO} + n_{MnO} + n_{CaO} + n_{MgO} + n_{SiO_2} + 2n_{P_2O_5} = 1,505.$$

Знаходимо іонні долі катіонів у шлаковому розплаві

$$x_{Mn} = \frac{n_{Mn}}{\sum n^+} = 0,099/1,505 = 0,066;$$

$$x_P = 2 \cdot 0,074/1,505 = 0,098; x_{Ca} = 0,332; x_{Mg} = 0,133; x_{Si} = 0,233.$$

Розраховуємо коефіцієнти активностей катіонів:

$$lg\gamma_{Fe} = \frac{1000}{1853} [2,18 \cdot 0,066 \cdot 0,233 + 5,9 \cdot (0,332 + 0,133) \cdot 0,233 + 10,5 \cdot 0,332 \cdot 0,098] = 0,547, \quad \gamma_{Fe} = 3,52$$

$$lg\gamma_{Mn} = 0,547 - \frac{2180}{1853} \cdot 0,233 = 0,273; \quad \gamma_{Mn} = 1,87$$

$$lg\gamma_P = 0,547 - \frac{10500}{1853} \cdot 0,332 = -1,334; \quad \gamma_P = 0,046.$$

Знаходимо активності компонентів шлаку:

$$a_{FeO} = x_{Fe} \cdot \gamma_{Fe} = 0,138 \cdot 3,52 = 0,486;$$

$$a_{MnO} = x_{Mn} \cdot \gamma_{Mn} = 0,066 \cdot 1,87 = 0,123;$$

$$a_{P_2O_5} = x_P^2 \cdot \gamma_P^2 = 0,098^2 \cdot 0,046^2 = 2,03 \cdot 10^{-5}.$$

Задача 3. Розрахувати активність MnO у розплавленому шлаку, що має склад, % 15 FeO; 9 MgO; 0,3 P₂O₅; 12 MnO, 38,22 CaO, 25,48 SiO₂, 0,3 P₂O₅. Температура розплаву 1600 °C. Розрахунок провести, використовуючи метод визначення активностей компонентів шлаку як фази, що має колективну електронну систему.

Розв'язання. Визначаємо число молей оксидів в 100 г шлаку:

Оксид	CaO	MgO	FeO	SiO ₂	MnO	P ₂ O ₅
n_i	0,6815	0,2233	0,2088	0,4240	0,1692	0,0021

Число грам-атомів елементів в 100 г шлаку

$$m_{Ca} = n_{CaO} = 0,6815; m_{Mg} = n_{MgO} = 0,2233; m_{Fe} = n_{FeO} = 0,2088;$$

$$m_{Si} = n_{SiO_2} = 0,4240; m_{Mn} = n_{MnO} = 0,1692; m_P = 2n_{P_2O_5} = 2 \cdot 0,0021 = 0,0042;$$

$$m_O = n_{CaO} + n_{MgO} + n_{FeO} + 2n_{SiO_2} + n_{MnO} + 5n_{P_2O_5} = 0,6815 + 0,2233 + 0,2088 + 0,8480 + 0,1692 + 0,0105 = 2,1413.$$

Сума грам-атомів усіх елементів шлаку

$$\sum m_i = 0,6815 + 0,2233 + 0,2088 + 0,4240 + 0,1692 + 0,0042 + 2,1413 = 3,8523.$$

Розраховуємо атомні частки усіх елементів $C_i = \frac{m_i}{\sum m_i}$:

C_{Ca}	C_{Mg}	C_{Fe}	C_{Si}	C_{Mn}	C_P	C_O
0,1769	0,0580	0,0542	0,1101	0,0439	0,0011	0,5559

Атомний коефіцієнт активності для марганцю

$$\psi_{Mn}^{-1} = C_{Ca} \cdot e^{-\frac{\epsilon_{Mn-Ca}}{RT}} + C_{Mg} \cdot e^{-\frac{\epsilon_{Mn-Mg}}{RT}} + C_{Fe} \cdot e^{-\frac{\epsilon_{Mn-Fe}}{RT}} + C_{Si} \cdot e^{-\frac{\epsilon_{Mn-Si}}{RT}} + C_{Mn} \cdot e^{-\frac{\epsilon_{Mn-Mn}}{RT}} + C_P \cdot e^{-\frac{\epsilon_{Mn-P}}{RT}} + C_O \cdot e^{-\frac{\epsilon_{Mn-O}}{RT}}.$$

Значення енергії обміну атомів марганцю та інших компонентів шлаку знаходимо

$$\varepsilon_{Mn-Ca} = \frac{1}{2} (\varkappa_{Mn}^{\frac{1}{2}} - \varkappa_{Ca}^{\frac{1}{2}})^2 = \frac{1}{2} (251^{0,5} - 104,6^{0,5})^2 = 15,767.$$

Аналогічно знаходимо інші значення енергій обміну:

ε_{Mn-Ca}	ε_{Mn-Mg}	ε_{Mn-Fe}	ε_{Mn-Si}	ε_{Mn-Mn}	ε_{Mn-P}	ε_{Mn-O}
15,767	7,006	3,006	3,773	0	1,163	191,747

Значення експонент для розрахунку атомних коефіцієнтів активності знайдемо за рівняння

$$A_{ij} = e^{-\varepsilon_{ij}/RT}, \text{ де } T = 1873 \text{ К та } R = 0,008314 \text{ кДж/моль}\cdot\text{К},$$

$$A_{Mn-Ca} = \exp\left(-\frac{\varepsilon_{Mn-Ca}}{RT}\right) = \exp\left(-\frac{15,767}{0,008314 \cdot 1873}\right) = 0,363.$$

Аналогічно визначимо усі значення експонент:

A_{Mn-Ca}	A_{Mn-Mg}	A_{Mn-Fe}	A_{Mn-Si}	A_{Mn-Mn}	A_{Mn-P}	A_{Mn-O}
0,363	0,638	0,824	0,785	1,0	0,928	0

Підставляючи отриманні величини атомних часток елементів і множників A , знаходимо значення атомного коефіцієнта активності для марганцю

$$\psi_{Mn}^{-1} = 0,1526 \cdot 0,363 + 0,0585 \cdot 0,638 + 0,0506 \cdot 0,824 + 0,0852 \cdot 0,785 + 0,0420 \cdot 1 + 0,0392 \cdot 0,928 + 0,5720 \cdot 0 = 0,2772,$$

$$\psi_{Mn} = \frac{1}{0,2772} = 3,6075.$$

Активність марганцю в шлаку $a_{Mn} = C_{Mn} \cdot \psi_{Mn} = 0,0439 \cdot 3,6075 = 0,1584$.

Це значення активності марганцю відповідає значенню активності MnO в шлаку $a_{Mn} = a_{MnO} = 0,1584$.

Задача 4. Визначити, використовуючи діаграму (рис. 1), активність FeO у розплавленому шлаку складу (мас. %): 15 FeO; 9 MgO; 0,3 P₂O₅; 12 MnO, основність шлаку 1,5 при температуру 1600 °С.

Розв'язання. На діаграмі рис. 1 склад шлаку виражений у мольних процентах, цьому потрібно перерахувати заданий у масових процентах склад шлаку на мольні проценти. Для цього знаходимо число молей кожного компонента в 100 г шлаку.

Нехай, відомі основність шлаку (B) і концентрація в ньому %FeO. Тоді

$$\frac{\%CaO}{\%SiO_2} = \frac{\%CaO}{(100 - \%FeO - A) - \%CaO} = B,$$

де $A = \%MnO + \%P_2O_5 + \%MgO + \dots$, звідси можна знайти вміст CaO і SiO₂.

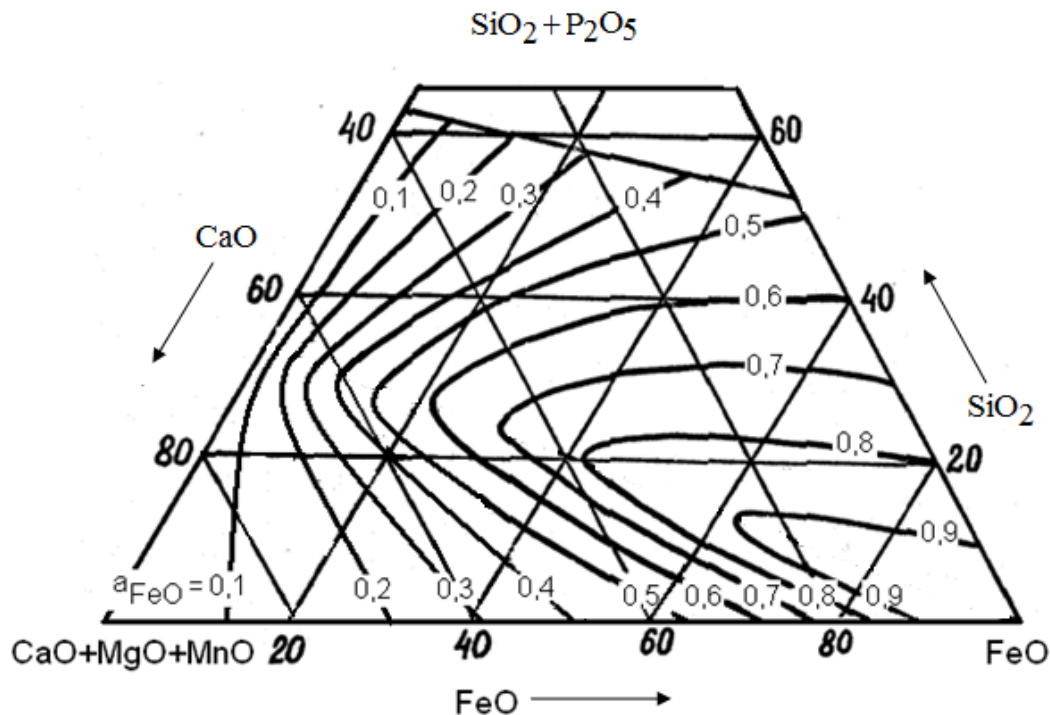


Рис. 1 - Лінії ізоактивностей для FeO (a_{FeO}) у сталеплавильних шлаках

Для умов задачі в результаті розрахунку отримали

Оксид	CaO	MgO	FeO	SiO ₂	MnO	P ₂ O ₅	B
%(мас.)	38,22	9	15	25,48	12	0,3	1,5

Молярна частка i -того компонента в розплаві $X_i = \frac{n_i}{\sum n_i}$, де n_i - число моль i -того компонента в розплаві, $\sum n_i$ - загальне число моль. Число моль кожного компонента знаходиться з виразу $n_i = \%i / M_i$, де $\%i$ - масовий процент i -того компоненту в розплаві, M_i - атомна або молекулярна маса i -того компонента:

Оксид	CaO	MgO	FeO	SiO ₂	MnO	P ₂ O ₅
M_i	56,08	40,31	71,85	60,09	70,94	141,94
n_i	0,682	0,223	0,209	0,424	0,169	0,002

Загальне число молей усіх компонентів шлаку $\sum n_i = 1,709$.

Знаходимо молярні проценти компонентів у шлаку $x_i = \frac{n_i}{\sum n_i} \cdot 100\%$:

Оксид	CaO	MgO	FeO	SiO ₂	MnO	P ₂ O ₅
Молярна частка	0,3988	0,1307	0,1222	0,2481	0,0990	0,0012
Молярна процент	39,88	13,07	12,22	24,81	9,90	0,12

Сумуємо концентрації основних і кислих оксидів
 (CaO) + (MnO) + (MgO) = 39,88 + 9,9 + 13,07 = 62,85% (мол);
 (SiO₂) + (P₂O₅) = 24,81 + 0,12 = 24,94% (мол).

На діаграмі знаходимо точку, яка відповідає квазітрёхкомпонентному шлаку: основні оксиди - 62,85%; кислі оксиди - 24,94%; (FeO) - 12,22%.

Цій точці відповідає значенню активності $a_{\text{FeO}} = 0,38$.

Оскільки мольна доля (FeO) в шлаку складає $x_{FeO} = 0,1222$, коефіцієнт активності FeO буде дорівнювати:

$$\gamma_{FeO} = \frac{a_{FeO}}{x_{FeO}} = \frac{0,38}{0,1222} = 3,11.$$

Задач 5. Використовуючи діаграму (рис. 1), побудувати графік, що показує зміну коефіцієнта активності FeO у розплавленому шлаку з постійним вмістом FeO = 30 %(мол.) в залежності від основності шлаку $B = \frac{CaO+MnO+MgO}{SiO_2+P_2O_5}$.

Розв'язання. На діаграмі ізоактивностей FeO знаходимо лінію, що відповідає концентрації FeO в шлаку, що дорівнює 30% (рис. 2). Визначаємо точки перетину ліній ізоактивностей FeO з лінією сталої концентрації FeO, що відповідає 30 % (мол.) FeO.

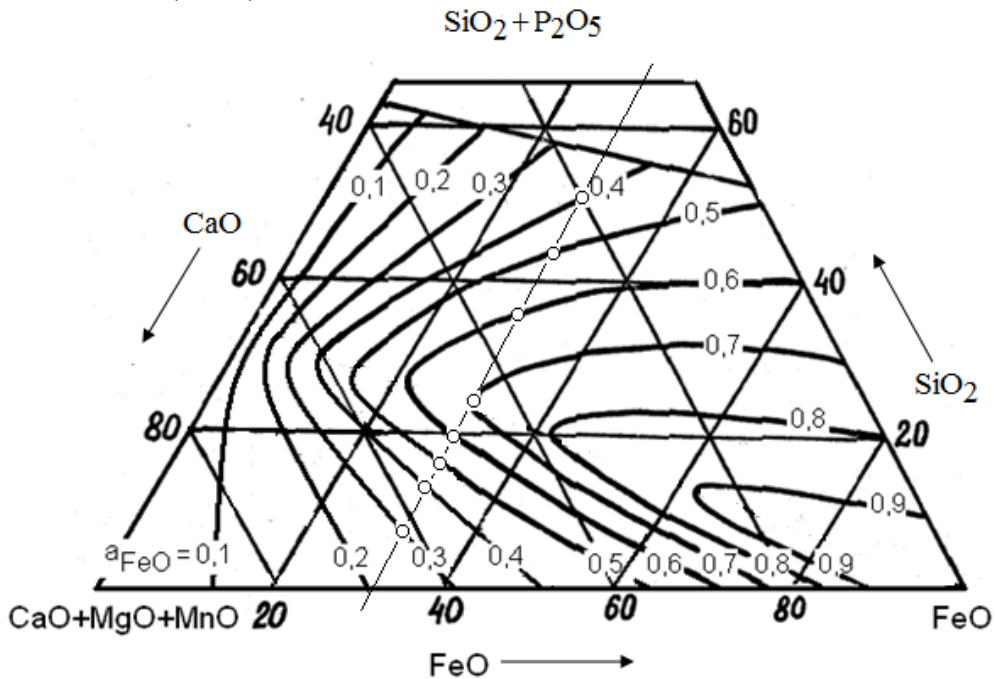


Рис. 2 – Схема визначення значень a_{FeO} у розплавленому шлаку зі сталим вмістом FeO (цифри у кривих – активність FeO)

Значення суми основних оксидів (CaO + MnO + MgO) і суми кислотних оксидів (SiO₂ + P₂O₅), що відповідають точкам перетину приведені нижче.

a_{FeO}	Сума основних оксидів, %	Сума кислотних оксидів, %	Основність, B	γ_{FeO}
0,3	62	9	6,9	1,00
0,4	56	14	4	1,33
0,5	53	17	3,1	1,67
0,6	50	20	2,5	2,00
0,7	45	25	1,8	2,33
0,6	35	35	1,0	2,00
0,5	26	44	0,6	1,67
0,4	20	50	0,4	1,33

З співвідношення $a_{FeO} = x_{FeO} \cdot \gamma_{FeO}$ знаходимо значення γ_{FeO} . За результатами розрахунків будемо графік залежності коефіцієнта активності

FeO від основності шлаку В (див. рис. 3). Як слідує з рис. 3, максимальне значення γ_{FeO} відповідає основності В = 2.

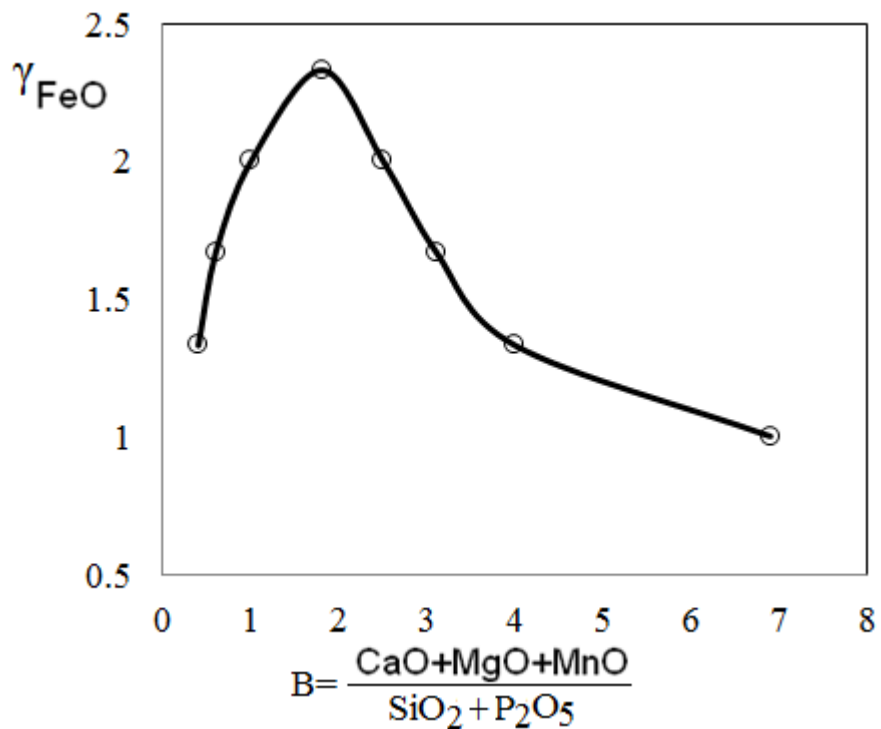


Рис. 3 – Залежність коефіцієнта активності FeO у розплавленому шлаку від величини відношення вмісту основних оксидів к вмісту кислотних оксидів для сталого вмісту (FeO)=30% (мол.)

Практичне заняття № 3 (2 години): «Вплив форми твердої речовини на визначення швидкості процесу. Визначення кінетичних рівнянь для зразків різної форми (плоский зразок (пластина), кулі, циліндра або дроту та куба)»

Форма твердої речовини, що вступають в реакцію с рідиною або газом, грає важливу роль для визначення швидкості процесу. Якщо тверда речовина має форму пластинки або диска, то площа поверхні протягом реакції буде незмінною, тому швидкість реакції буде сталою. За умови зневаги реакції на торцях. Якщо зразок має форму циліндра або кулі, то в міру протікання реакції площа поверхні і відповідно швидкість реакції буде змінюватися.

Розглянемо реакцію системи тверде тіло - рідина, наприклад розчинення металу в кислоті. Припустимо, що концентрація кислоти залишається постійною протягом всієї реакції, тоді

$$-\frac{dM}{d\tau} = kFC \quad (1)$$

де M - маса твердого тіла в момент часу, τ ; F – площа її поверхні; C – концентрація кислоти; k - константа швидкості.

Негативний знак показує, що маса при розчиненні убуває.

При зміні геометрії твердого тіла виходять різні кінетичні рівняння.

Плоский зразок (пластинка).

Площа поверхні F буде стала протягом всього процесу розчинення

$$-\int_{M_0}^M dM = kFC \int_0^{\tau} d\tau, \quad (2)$$

$$M_0 - M = kFC\tau \quad (3)$$

Отже, графік залежності $M_0 - M$ від τ повинен бути прямою лінією з нахилом, що дорівнює kFC , з котрого можна розрахувати k .

Зразок у формі шару.

Площа поверхні буде спадати протягом часу:

$$\left. \begin{aligned} -\frac{dM}{d\tau} &= kFC \\ F &= 4\pi r^2 \\ M &= \frac{4}{3}\pi r^3 \rho \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

де r – радіус, а ρ - щільність.

$$\text{Отже, } r = \left(\frac{3M}{4\pi\rho} \right)^{1/3} \quad \text{і} \quad F = 4\pi \left(\frac{3M}{4\pi\rho} \right)^{2/3}$$

$$-\frac{dM}{d\tau} = k4\pi \left(\frac{3}{4\pi\rho} \right)^{2/3} M^{2/3} C = k' M^{2/3},$$

$$-\int_{M_0}^M \frac{dM}{M^{2/3}} = k' \int_0^\tau d\tau,$$

$$3(M_0^{1/3} - M^{1/3}) = k' \tau \quad (5)$$

Отже, графік залежності $(M_0^{1/3} - M^{1/3})$ від τ або $M^{1/3}$ від τ повинен бути прямою лінією.

Зразок у виді циліндра або проволочки.

Нехтуючи реакцією на кінцях і вважаючи довжину циліндра або дроту $l = \text{const}$, получимо наступні рівняння:

$$\left. \begin{aligned} -\frac{dM}{d\tau} &= kFC \\ F &= 2\pi r l \\ M &= \pi r^2 l \rho \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Отже, $r = \left(\frac{M}{\pi l \rho}\right)^{1/2}$, $F = 2\pi l \left(\frac{M}{\pi l \rho}\right)^{1/2} = 2\left(\frac{\pi l}{\rho}\right)^{1/2} M^{1/2}$,

$$-\frac{dM}{d\tau} = 2k\left(\frac{\pi l}{\rho}\right)^{1/2} M^{1/2} C = k' M^{1/2}, \quad -\int_{M_0}^M \frac{dM}{M^{1/2}} = k' \int_0^\tau d\tau,$$

$$2(M_0^{1/2} - M^{1/2}) = k' \tau \quad (7)$$

Отже, графік залежності $(M_0^{1/2} - M^{1/2})$ від τ або $M^{1/2}$ від τ повинен бути прямою лінією.

Зразок у формі куба.

В цьому випадку використовуємо рівняння:

$$\left. \begin{aligned} -\frac{dM}{d\tau} &= kFC \\ F &= 6r^2 \\ M &= r^3 \rho \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

Отже,

$$r = \left(\frac{M}{\rho}\right)^{1/3}, \quad F = 6\left(\frac{M}{\rho}\right)^{2/3}, \quad -\frac{dM}{d\tau} = 6k \frac{M^{2/3}}{\rho^{2/3}} C = k' M^{2/3} \quad (9)$$

Отримуємо рівняння таке ж, як для кулі.

Рівняння швидкості, що виражені в частках, що прореагували.

Частка, що прореагувала, твердої речовини (ступінь перетворення) задається виразом $\alpha = \frac{M_0 - M}{M_0}$. Кінетичні рівняння для зразків різної форми наведені нижче:

1. Шар

$$\alpha = \frac{\frac{4}{3} \pi r_0^3 \rho - \frac{4}{3} \pi r^3 \rho}{\frac{4}{3} \pi r_0^3 \rho} = 1 - \frac{r^3}{r_0^3},$$

$$\frac{r^3}{r_0^3} = 1 - \alpha, \quad r = r_0 (1 - \alpha)^{1/3}$$

Для розрахунку використовуємо рівняння (1). отримаємо:

$$\begin{aligned} -\frac{dM}{d\tau} &= 4\pi r^2 \frac{dr}{d\tau}, & -4\pi r^2 \frac{dr}{d\tau} &= 4\pi r^2 kC, \\ -\int_{r_0}^r dr &= \frac{kC}{\rho} \int_0^\tau d\tau, & r_0 - r &= \frac{kC}{\rho} \tau, & r_0 - r_0(1 - \alpha)^{1/3} &= \frac{kC}{\rho} \tau, \\ 1 - (1 - \alpha)^{1/3} &= \frac{kC}{r_0 \rho} \tau \end{aligned} \quad (10)$$

Графік залежності $1 - (1 - \alpha)^{1/3}$ від τ дає пряму лінію.

2. Куб

$$\alpha = \frac{r_0^3 \rho - r^3 \rho}{r_0^3 \rho} = 1 - \frac{r^3}{r_0^3}, \quad r = r_0 (1 - \alpha)^{1/3}$$

Для розрахунку використовуємо рівняння швидкості (1). Отримаємо:

$$\begin{aligned} -\rho 3r^2 \frac{dr}{d\tau} &= 6r^2 kC, & -\int_{r_0}^r dr &= \frac{2kC}{\rho} \int_0^\tau d\tau, \\ r_0 - r &= \frac{2kC}{\rho} \tau, \\ 1 - (1 - \alpha)^{1/3} &= \frac{2kC}{r_0 \rho} \tau \end{aligned} \quad (11)$$

Отже, графік залежності $1 - (1 - \alpha)^{1/3}$ від τ дає пряму лінію.

3. Циліндр.

$$\alpha = \frac{\pi r_0^2 l \rho - \pi r^2 l \rho}{\pi r_0^2 l \rho} = 1 - \frac{r^2}{r_0^2}, \quad r = r_0 (1 - \alpha)^{1/2}.$$

$$-\frac{dM}{d\tau} = kFC, \quad -2\pi r l \rho \frac{dr}{dt} = 2\pi r l k C, \quad -\int_{r_0}^r dr = \frac{kC}{\rho} \int_0^\tau d\tau,$$

$$r_0 - r = \frac{kC\tau}{r_0\rho},$$

$$1 - (1 - \alpha)^{1/2} = \frac{kC\tau}{r_0\rho} \tag{12}$$

отже, графік залежності $1 - (1 - \alpha)^{1/2}$ від τ дає пряму лінію.