

파이썬 프로그래밍을 통한 화학반응속도 빅데이터 처리 및 반응차수 결정(2 ~ 3차시)

#0 수업 안내

#0 수업 안내

#1 장치 소개

#2 이론적 배경

#3 실험도구, 시약

#4 실험 방법

#5 실험 결과

#6 정리

오늘은

프로그래밍을 통한 화학반응속도 빅데이터 처리 및 반응차수 결정

학습목표

- 식용색소 blue#1과 과산화수소의 탈색반응을 이용한 반응속도론 실험을 수행할 수 있다.
- 실험 결과를 바탕으로 반응 차수를 자동화하는 프로그래밍 아이디어를 제시할 수 있다.

#1 아두이노 조도 측정 장치 소개

최종 선정된 아두이노 장치

#0 수업 안내

#1 장치 소개

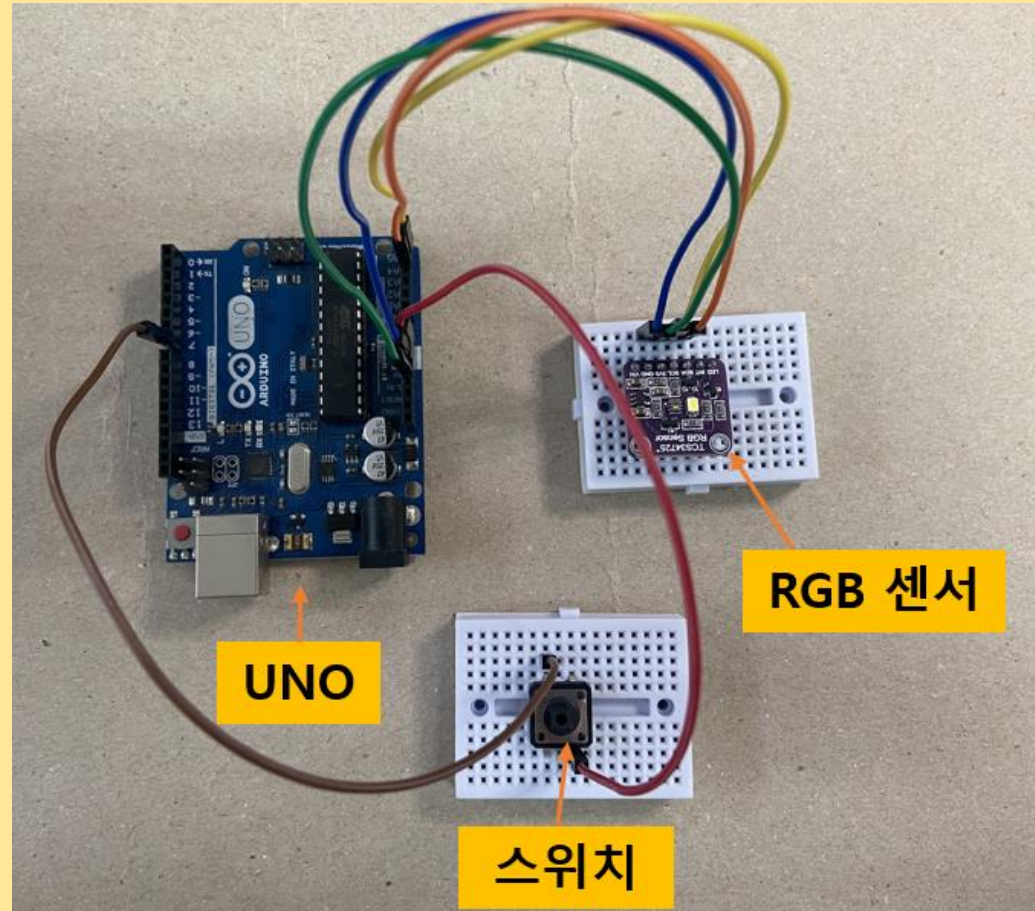
#2 이론적 배경

#3 실험도구, 시약

#4 실험 방법

#5 실험 결과

#6 정리



#1 아두이노 조도 측정 장치 소개

아두이노 장치 제작 방법

#0 수업 안내

#1 장치 소개

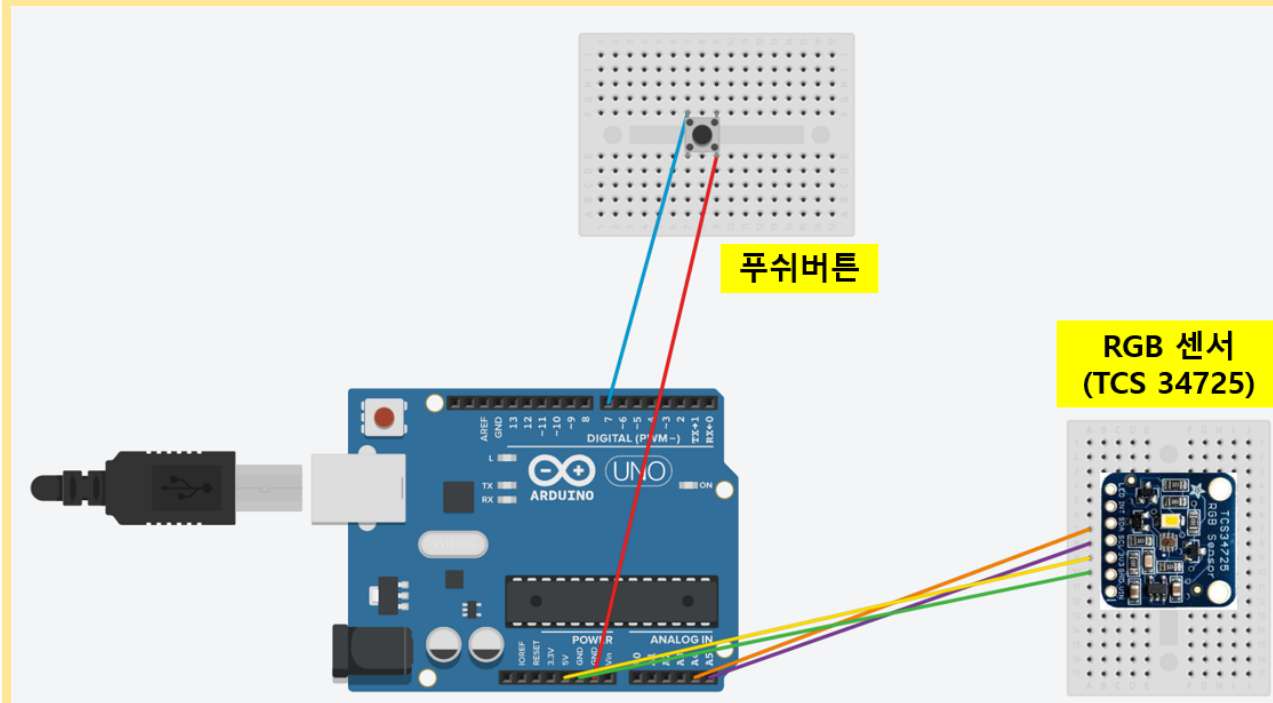
#2 이론적 배경

#3 실험도구, 시약

#4 실험 방법

#5 실험 결과

#6 정리



1. RGB 센서 연결

[센서]	[UNO]
GND	GND
3V3	5V
SCL	A5
SDA	A4

2. 푸쉬버튼 연결

대각선 연결	GND
	7

(아두이노 회로도):
<https://www.tinkercad.com/>

#1 아두이노 조도 측정 장치 소개

반응물 농도 측정의 원리

#0 수업 안내

#1 장치 소개

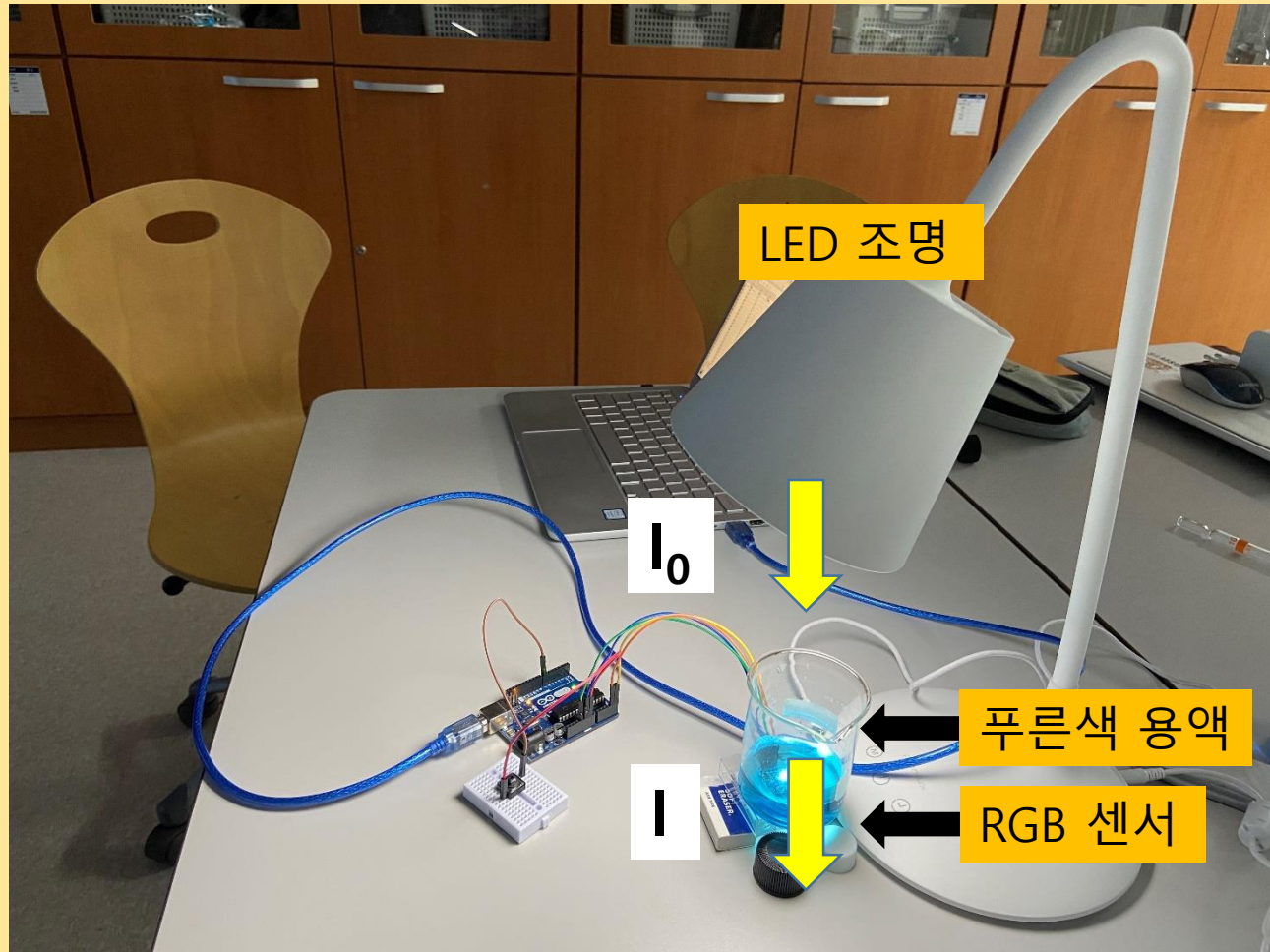
#2 이론적 배경

#3 실험도구, 시약

#4 실험 방법

#5 실험 결과

#6 정리



#2 실험의 이론적 배경

(참고 문헌):
10.1021/acs.jchemed.8b00589.

식용색소 blue#1과 과탄산나트륨의 반응: 반응속도론 실험

#0 수업 안내

#1 장치 소개

#2 이론적 배경

#3 실험도구, 시약

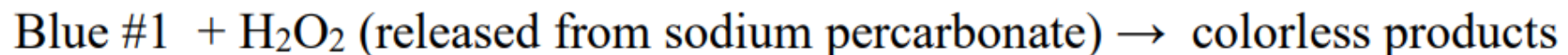
#4 실험 방법

#5 실험 결과

#6 정리

- 염료의 탈색 과정

sodium percarbonate는 서서히 과산화 수소를 방출하고, 이것은 염료를 산화시키며 탈색시킨다.



반응속도법칙은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\text{Rate} = k [\text{H}_2\text{O}_2]^y [\text{Blue \#1}]^x$$

과량의 sodium percarbonate를 사용하여 과량의 과산화 수소를 생성시키면, 과산화 수소의 농도는 상수 취급하여 다음과 같은 속도식으로 근사할 수 있다.

$$\text{Rate} \approx k' [\text{Blue \#1}]^x$$

$$k' = k [\text{H}_2\text{O}_2]^y$$

#2 실험의 이론적 배경

식용색소 blue#1과 과탄산나트륨의 반응: 반응속도론 실험

#0 수업 안내

#1 장치 소개

#2 이론적 배경

#3 실험도구, 시약

#4 실험 방법

#5 실험 결과

#6 정리

- PART1. Graphical Method. Blue #1에 대한 반응 차수 결정
 - x와 k'을 구하는 것이 목표 $\text{Rate} \approx k' [\text{Blue \#1}]^x$
 - 적분속도법칙을 이용해 선형의 그래프가 나타날 때를 찾아 x를 결정하고, 그래프의 기울기로부터 k'를 계산한다.

	반응 속도식	반감기	농도식
0차 반응	$v = k[A]^0$	$t = \frac{[A]_0}{2k}$	$[A]_t = -kt + [A]_0$
1차 반응	$v = k[A]^1$	$t = \frac{\ln 2}{k}$	$\ln[A]_t = -kt + \ln[A]_0$
2차 반응	$v = k[A]^2$	$t = \frac{1}{k[A]_0}$	$\frac{1}{[A]_t} = \frac{1}{[A]_0} + kt$

#2 실험의 이론적 배경

식용색소 blue#1과 과탄산나트륨의 반응: 반응속도론 실험

#0 수업 안내

#1 장치 소개

#2 이론적 배경

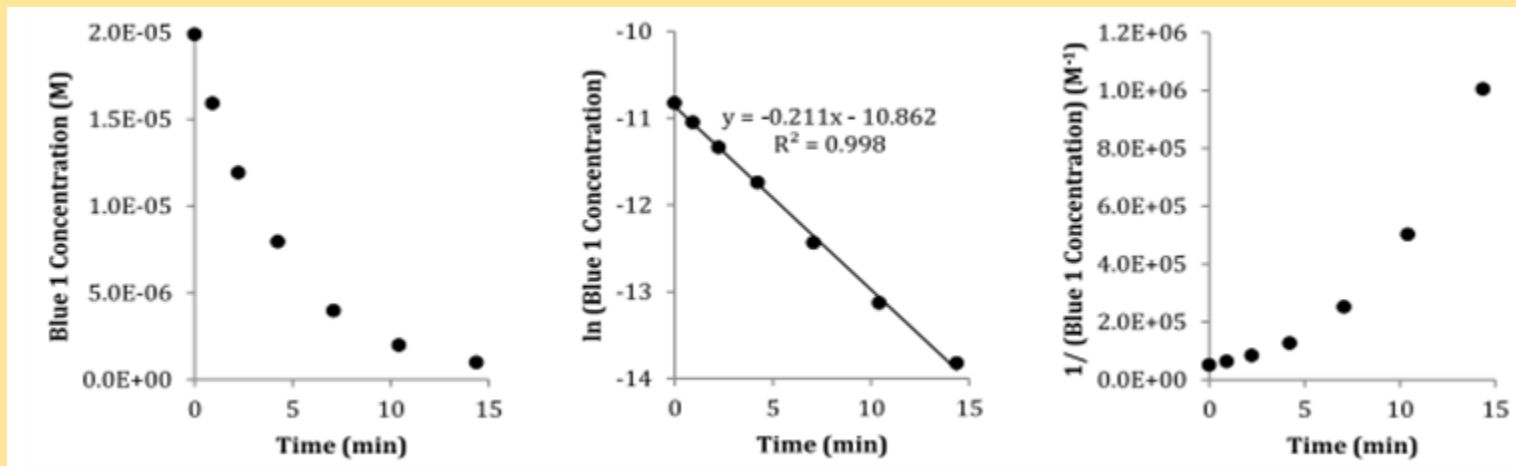
#3 실험도구, 시약

#4 실험 방법

#5 실험 결과

#6 정리

- PART1. Graphical Method. Blue #1에 대한 반응 차수 결정
 - x 와 k' 을 구하는 것이 목표
 - 적분속도법칙을 이용해 선형의 그래프가 나타날 때를 찾아 x 를 결정하고, 그래프의 기울기로부터 k' 를 계산한다.



(반응속도론 그래프):
10.1021/acs.jchemed.8b00589.

#2 실험의 이론적 배경

식용색소 blue#1과 과탄산나트륨의 반응: 반응속도론 실험

#0 수업 안내

#1 장치 소개

#2 이론적 배경

#3 실험도구, 시약

#4 실험 방법

#5 실험 결과

#6 정리

PART2. 초기속도법을 이용한 속도 법칙 결정

- 초기속도법을 이용
- H_2O_2 의 농도를 다양하게 하고, Blue#1의 농도를 고정시켜 v 를 계산한다. v 를 비교하여 y 를 찾을 수 있다.

$$\text{Rate} = k [\text{H}_2\text{O}_2]^y [\text{Blue \#1}]^x$$

Hydrogen peroxide concentration (from sodium percarbonate)	Blue #1 dye concentration	Initial Rate
a	b	$rate\ 1$
$2a$	b	$rate\ 2$

(초기속도법):
10.1021/acs.jchemed.8b00589.

#3 실험 도구 및 시약

식용색소 blue#1과 과탄산나트륨의 반응: 반응속도론 실험

#0 수업 안내

#1 장치 소개

#2 이론적 배경

#3 실험도구, 시약

#4 실험 방법

#5 실험 결과

#6 정리

- **실험 도구** : 아두이노 UNO, RGB 센서(TSC-34725), 100-mL 비커, LED 전구가 달린 램프, 교반기, 디지털 온도계, 매스실린더, 약스푼, 타이머
- **시약** : FD&C Blue #1 파우더(792.85 g/mol), 과탄산 나트륨
- **기타 준비 사항**
 - 조도 측정용 비커는 100mL이 가장 좋으며, 조도를 측정할 때는 항상 **똑같은 비커를 씻어서 사용**한다.
 - Blue 1 표준 용액 준비 :
2.00x10⁻⁵M Blue 1 Stock Solution
(0.0159 g Blue #1, 총 부피 1L로 용해)

#3 실험 도구 및 시약

식용색소 blue#1과 과탄산나트륨의 반응: 반응속도론 실험

#0 수업 안내

#1 장치 소개

#2 이론적 배경

#3 실험도구, 시약

#4 실험 방법

#5 실험 결과

#6 정리

• 기타 준비 사항

- 표준 용액을 희석한 용액 제조(교사가 미리 준비)

희석 용액	2.00x10 ⁻⁵ M Blue #1 Stock Solution (mL)	증류수(mL)	희석 용액 몰농도
80%	200	50	1.6 x 10 ⁻⁵ M
60%	150	100	1.2 x 10 ⁻⁵ M
40%	100	150	0.8 x 10 ⁻⁵ M
20%	50	200	0.4 x 10 ⁻⁵ M
10%	25	225	0.2 x 10 ⁻⁵ M
5%	12.5	237.5	0.1 x 10 ⁻⁵ M

- 과탄산 나트륨 용액 준비

: 실험 전에 항상 교반기를 이용해 최소 20분 동안 저어주어야한다.

- LED 스탠드는 미리 켜두어(예열) 조명값을 일정하게 해둔다.

#4 실험 방법

Part 1: Graphical Method. Blue #1에 대한 반응 차수 결정

#0 수업 안내

#1 장치 소개

#2 이론적 배경

#3 실험도구, 시약

#4 실험 방법

#5 실험 결과

#6 정리

- ① 눈금실린더를 이용하여 25.0mL의 증류수를 50mL비커에 넣는다. 후드 아래에서 스티어바를 비커에 넣고 교반기를 이용해 젓는다.
- ② 1.50g의 과탄산나트륨을 약포지에 덜어놓는다.
- ③ 시간을 기록하면서, 증류수가 들어있는 비커에 넣는다. 20분동안 교반하여 충분히 과탄산나트륨을 녹인다. 과산화수소가 산소 기체로 분해되며 버블이 생길 것이다.
- ④ 100mL비커에 $2.00 \times 10^{-5} \text{M}$ Blue #1 용액 30mL를 넣는다.
- ⑤ 과정 3에서 제조한 과탄산나트륨 용액 2mL를 Blue #1 이 담긴 용액에 재빨리(중요!) 넣고, 막대로 재빨리(중요!) 섞은후 조도(R값) 측정용 장치에 재빨리(중요!) 넣는다. 그리고 80%, 60%, 40%, 20%, 10%, 5% 농도에 도달할 때 까지 걸린 시간을 측정한다. → 실험 결과 기록
- ⑥ 시간(t)에 따른 농도([A]) 데이터를 EXCEL로 0차, 1차, 2차 그래프로 그려 [Blue #1]에 대한 반응 차수(x)를 결정한다.

#4 실험 방법

Part 2: 초기속도법을 이용한 속도 법칙 결정

[실험 개요] 조도계 장치를 설치한다. 학생들은 반응의 20%가 완료되었을 때(=Blue 1이 80% 남아있을 때)를 판단하기 위한 표준 조도(R값)을 얻기 위해 블루 1 희석용액 **80%, 54 mL**를 통해 전달되는 조도(R값)을 측정해둔다. 동일한 비커를 사용하여 <표 3>의 세가지 용액을 제조하고, 염료가 20% 반응하는 데 걸리는 시간을 측정한다.

- ① 증류수 40.0mL를 100mL 비커에 넣는다. 스티어바를 넣고, 후드 아래에서 교반한다.
- ② 2.40g의 과탄산나트륨을 증류수가 들어있는 비커에 넣고, 20분 동안 교반한다.
- ③ 과탄산나트륨이 충분히 녹으면 과산화수소가 분해되어 생성된 산소 거품을 관찰할 수 있다.
- ④ 조도 측정용 장치를 설치한다. (조명이 예열되어있지 않으면 RGB센서에서 측정되는 값은 일정하지 않을 것이다.)

#0 수업 안내

#1 장치 소개

#2 이론적 배경

#3 실험도구, 시약

#4 실험 방법

#5 실험 결과

#6 정리

#4 실험 방법

Part 2: 초기속도법을 이용한 속도 법칙 결정

- ⑤ 실험 part1에서 만든 60%자리 54mL를 사용하여 조도(R값)을 측정한다.→ 실험 결과 기록
- ⑥ <표3>의 용액 1을 제조한다.(이 때, 과탄산나트륨은 조도(R값)측정 직전에 첨가한다.)
- ⑦ 단계⑤에서 측정한 조도 값에 도달할 때 까지 걸린 시간을 측정한다.
- ⑧ 용액 2, 3에 대해서도 같은 실험을 반복한다.

<표3> 초기속도법을 위한 3가지 농도의 용액

용액 번호	2×10^{-5} M Blue #1 용액 (mL)	첨가한 증류수 부피(mL)	과탄산나트륨 용액 부피 (mL)	전체 부피 (mL)	20% 반응했을 때의 조도값 (R값) =단계⑤결과	20% 반응했을때까지 걸린 시간 (min, sec)
1	50.0	0.0	4.0	54.0		
2	50.0	2.0	2.0	54.0		
3	50.0	3.0	1.0	54.0		

#0 수업 안내

#1 장치 소개

#2 이론적 배경

#3 실험도구, 시약

#4 실험 방법

#5 실험 결과

#6 정리

#5 실험 결과

Part 1: Graphical Method. Blue #1에 대한 반응 차수 결정

- Q1) 해당 농도에 도달하는데 까지 걸린 시간 측정값

농도	시간(s)	조도값 - <표2>의 R값
100%(시작)	0	29
80%	10	44
60%	110	56
40%	210	71
20%	460	116
10%	660	145
5%	725	153

#0 수업 안내

#1 장치 소개

#2 이론적 배경

#3 실험도구, 시약

#4 실험 방법

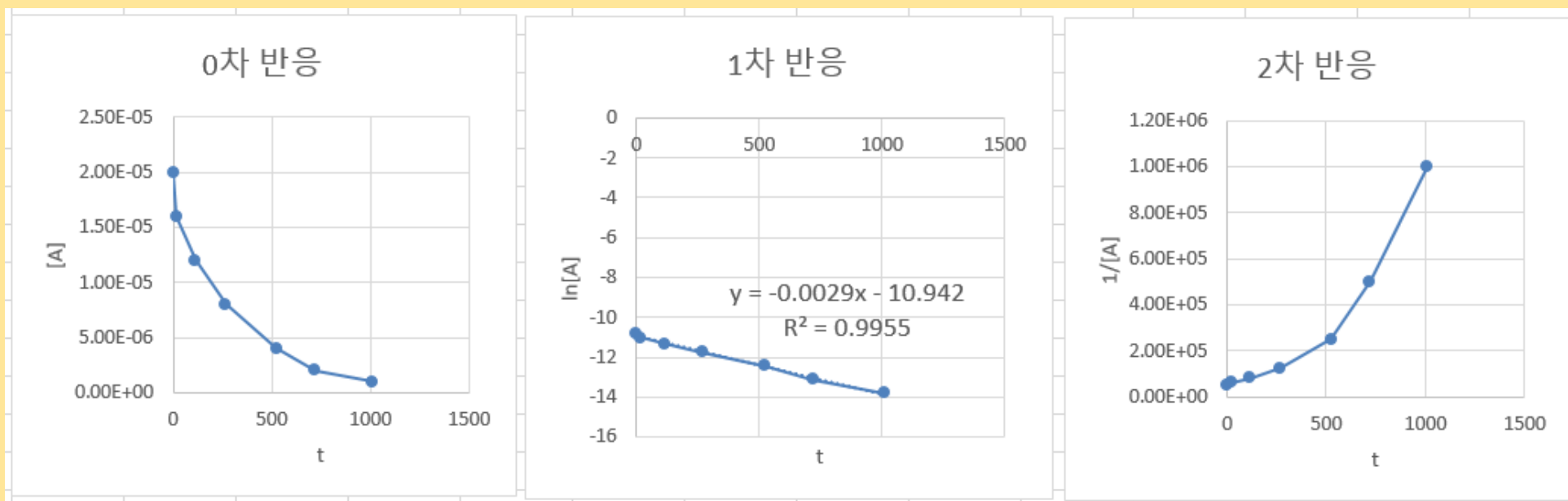
#5 실험 결과

#6 정리

#5 실험 결과

Part 1: Graphical Method. Blue #1에 대한 반응 차수 결정

Q2) Excel을 활용하여 0차, 1차, 2차 반응을 가정한 그래프를 그리고, Blue #1의 반응 차수(x)를 결정하시오.



1차 반응을 가정한 그래프가 선형을 나타내므로 $x = 1$ 이다.

#0 수업 안내

#1 장치 소개

#2 이론적 배경

#3 실험도구, 시약

#4 실험 방법

#5 실험 결과

#6 정리

#5 실험 결과

Part 2: 초기속도법을 이용한 속도 법칙 결정

Q1) 농도 80% Blue #1, 54mL 기준 시약의 조도값(R값) : 56

Q2) 실험 결과

용액 번호	$2 \times 10^{-5} \text{ M}$ Blue #1 용액 (mL)	첨가한 증류수 부피(mL)	과탄산나트륨 용액 부피 (mL)	전체 부피 (mL)	20% 반응했을 때의 조도값 (R값)	20% 반응했을때까지 걸린 시간 (min, sec)
1	50.0	0.0	4.0	54.0	40	117s
2	50.0	2.0	2.0	54.0	40	230s
3	50.0	3.0	1.0	54.0	40	537s

#0 수업 안내

#1 장치 소개

#2 이론적 배경

#3 실험도구, 시약

#4 실험 방법

#5 실험 결과

#6 정리

#5 실험 결과

Part 2: 초기속도법을 이용한 속도 법칙 결정

Q3) 데이터 처리(반응 속도 계산)

용액 번호	혼합물에서 Blue #1 용액의 초기 농도(M)	혼합물에서 과탄산나트륨 용액의 초기 농도(M)	*혼합물에서 과산화 수소의 초기 농도(M)	20% 반응했을때까 지 걸린 시간 (sec)	**반응 속도 계산(M/s)
1	$1.85 \times 10^{-5} \text{M}$	0.282M	0.565M	117s	$\frac{0.2 \times 1.85 \times 10^{-5}}{117\text{s}}$ $= 3.16 \times 10^{-8}$
2	$1.85 \times 10^{-5} \text{M}$	0.0141M	0.282M	230s	$\frac{0.2 \times 1.85 \times 10^{-5}}{230\text{s}}$ $= 1.61 \times 10^{-8}$
3	$1.85 \times 10^{-5} \text{M}$	0.007M	0.014M	530s	$\frac{0.2 \times 1.85 \times 10^{-5}}{530\text{s}}$ $= 0.70 \times 10^{-8}$

#0 수업 안내

#1 장치 소개

#2 이론적 배경

#3 실험도구, 시약

#4 실험 방법

#5 실험 결과

#6 정리

#5 실험 결과

Part 2: 초기속도법을 이용한 속도 법칙 결정

#0 수업 안내

#1 장치 소개

#2 이론적 배경

#3 실험도구, 시약

#4 실험 방법

#5 실험 결과

#6 정리

Q4) 과산화 수소에 따른 반응 속도 차수(y) 계산

- 용액 1, 2 결과 비교를 통한 반응 차수 계산:
- 용액 2, 3 결과 비교를 통한 반응 차수 계산:

두 실험 모두 과탄산나트륨의 농도가 2배 묽어짐에 따라 반응속도가 대략 2배 느려지므로, $y = 1$ 이다.

따라서 $\text{Rate} = k [\text{H}_2\text{O}_2]^y [\text{Blue \#1}]^x$ 에서 $x=1, y=1$ 임을 알 수 있다.

#5 실험 결과

고찰 – 프로그래밍 아이디어 조별 토의

- 실험 데이터를 그래프 등으로 가공하지 않고도 반응물 농도 데이터를 바탕으로 반응속도차수를 자동으로 결정해주는 **SI프로그램** 구상



#0 수업 안내

#1 장치 소개

#2 이론적 배경

#3 실험도구, 시약

#4 실험 방법

#5 실험 결과

#6 정리

#6 정리

고찰 – 프로그래밍 아이디어 발표

- 실험 데이터를 그래프 등으로 가공하지 않고도 반응물 농도 데이터를 바탕으로 반응속도차수를 자동으로 결정해주는 **AI프로그램** 구상

예시답안 1) 시간에 따른 반응물 데이터를 통해 반감기를 계산하도록 프로그래밍 하여 반응 차수를 결정할 수 있다.

예시답안 2) 적분속도식을 프로그래밍에 이용하여 세 점에서의 기울기가 일치할 때의 반응 차수를 찾는다.

#0 수업 안내

#1 장치 소개

#2 이론적 배경

#3 실험도구, 시약

#4 실험 방법

#5 실험 결과

#6 정리