

Лекция. Основы химической
кинетики

Механизм хим. реакции

Типы реакций

Скорость хим. реакции

Энергия активации

Уравнение Аррениуса

Химическая кинетика – раздел
химии, изучающий _____ и
_____ химических
реакций

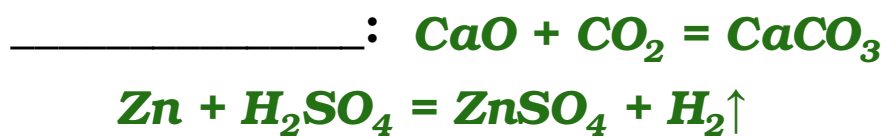
Химические реакции



(ж+ж, г+г)



(г+ж, г+тв)



25.08.2008

3

МЕХАНИЗМ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ

25.08.2008

4

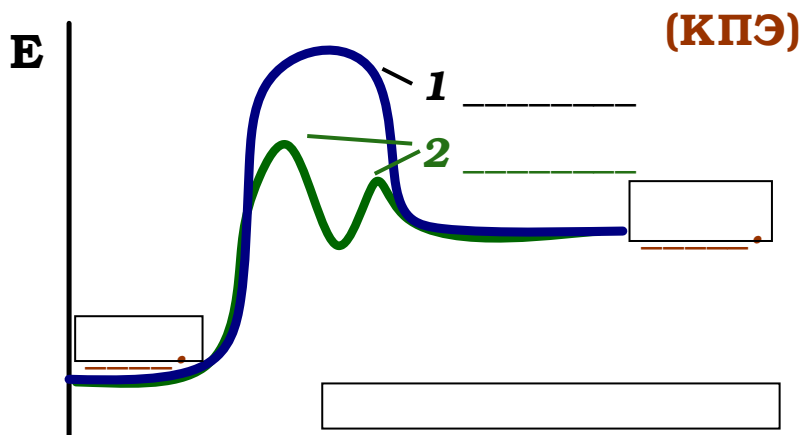
Механизм хим.реакции – _____
реакции, т.е. подробное изменение
_____ частиц

- ✓ _____ и _____ атомов
- ✓ _____ молекул, их частей
- ✓ _____ хим. связей
- ✓ _____ новых хим. связей
- ✓

25.08.2008

5

Кривая потенциальной энергии



Элементарная стадия – хим.реакция,
протекающая _____, с _____

25.08.2008
энергетическим барьером

6

Классификация:

1. **Простые х.р.** (в 1 стадии)

Простая = одностадийная =

Примеры простых реакций:



25.08.2008

7

Молекулярность – количество частиц, которые _____ в _____ элементарной стадии

Для простой реакции: **$aA + bB \rightarrow$ продукт**

$(a + b) = 1$ – _____

$(a + b) = 2$ – _____

$(a + b) = 3$ – _____

$(a + b) = 3$

25.08.2008

8

2. Сложные (с образованием _____ продуктов)

2.1. Последовательные х.р.

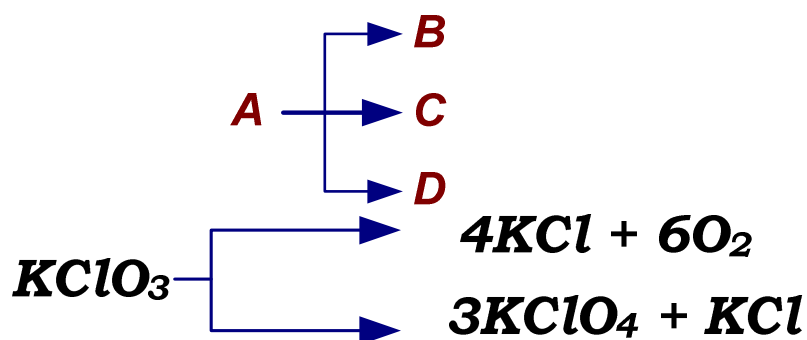


Лимитирующая стадия – стадия, которая будучи _____, протекала бы _____ других

25.08.2008

9

2.2. Параллельные х.р.



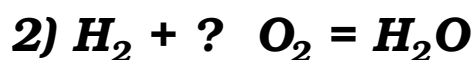
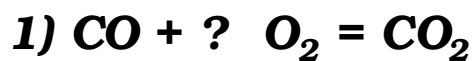
Состав продуктов и **скорость** (по убыли реагентов) определяется _____, а в пределе – самой _____ из параллельных реакций

25.08.2008

10

2.3. **Сопряженные х.р.**

(протекание одной реакции
_____ параллельно
протекающей другой реакцией)



Химическая индукция - 1-я х.р.

_____ 2-ой или 2-я х.р.

_____ 1-ю.

25.08.2008

11

2.4. **Цепные** (связанная система сложных реакций, протекающих

_____, _____ и
_____ с участием _____
_____)

Пример:



25.08.2008

12

СКОРОСТЬ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ (СХР)

25.08.2008

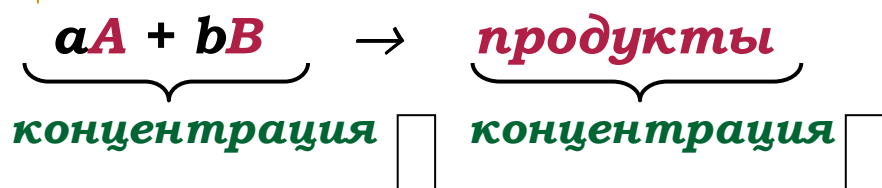
13

СХР – число _____
_____ взаимодействия
веществ, происходящих в ед.
_____ и в ед. _____ (гом.)
или на ед. _____ (гет.)

$$\begin{array}{l} \text{_____} : \\ N - \text{_____} \end{array} \rightarrow \frac{dN}{d\tau} \frac{1}{V} = V_{\text{гом}}$$
$$\begin{array}{l} \text{_____} : \\ \text{_____} \end{array} \rightarrow \frac{dN}{d\tau} \frac{1}{S} = V_{\text{гет}}$$

25.08.2008

14



Под СХР понимают _____
 _____ во времени

Виды СХР

Средняя скорость: $V =$

(Скорости измеряют по отдельным реагентам и продуктам)



Мгновенная (истинная) скорость:

~~расходуются~~ ~~накапливаются~~

СХР зависит от :

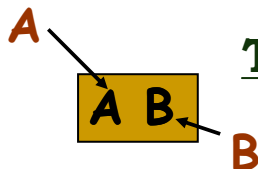


- ✓ **Природы реагирующих веществ**
 - ✓ **Концентрации**
 - ✓ **Температуры, давления**
 - ✓ **Катализаторов/ингибиторов**
 - ✓ **Интенсивности света**
 - ✓ **Потенциалов электродов**
 - ✓ **Дозы излучения**
-

СХР И КОНЦЕНТРАЦИЯ. КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ



«Какова вероятность того, что частицы A и B столкнутся?»



Теория вероятностей:

$$W_{AB} \sim \underline{\hspace{2cm}}$$

W_A — вероятность попадания молекул A в определённую точку, она пропорциональна числу молекул A (конц. n_A), поэтому:

$$V = \underline{\hspace{2cm}}$$

25.08.2008

19

k — константа скорости х.р.

1 молекула A и **1** молекула B

$$V = \underline{\hspace{2cm}}$$

2 молекулы A и **1** молекула B

$$V = \underline{\hspace{2cm}}$$

2 молекулы A и **2** молекулы B

$$V = \underline{\hspace{2cm}}$$

и так далее

25.08.2008

20

Для _____ реакции:



$$V = k \cdot C_A^a \cdot C_B^b$$

Закон действующих масс:

(_____, 1856 г.)

a, b – _____

коэффициенты

$$a + b = m$$

_____ реакции

25.08.2008

21

Для _____ реакции:



$$V =$$

α, β – _____

по компонентам A и B

$$\alpha + \beta = p$$

_____ – порядок реакции

25.08.2008

22

$$V = k \cdot C_A^\alpha \cdot C_B^\beta$$



Простая х.р. **Сложная х.р.**

$$\left. \begin{array}{l} \alpha \text{ - } a \\ \beta \text{ - } b \end{array} \right\}$$

$$m = \underline{\hspace{2cm}}$$

$$\left. \begin{array}{l} \alpha \text{ - } a \\ \beta \text{ - } b \end{array} \right\}$$

$$p = \underline{\hspace{2cm}}$$



Частные кинетические порядки

реакций (r_x) определяют _____
 _____ – при постоянных концентрациях
 (C_x) всех реагентов _____ (C_A). Тогда:

$$k \cdot C_B \cdot C_C \cdot C_D \cdot \dots = \underline{\hspace{2cm}}$$

$$V = \underline{\hspace{2cm}}$$

При этом r_x можно определить
двумя способами:

■ 2. Вычислением r_A

после логарифмирования:

$$r_A = \text{_____}$$

Здесь V_A и C_A – величины скорости и концентрации при **постоянной концентрации**

СМЫСЛ КОНСТАНТЫ СКОРОСТИ (k)

При $C_A = \text{___}$, $C_B = \text{___}$

$$V = \text{_____} = k - \text{_____}$$

скорость реакции

k зависит от: природы _____

k не зависит от _____

$$V = \text{_____}, \quad k = \text{_____}$$

СХР и ПРИРОДА РЕАГИРУЮЩИХ ВЕЩЕСТВ:

Природа определяется

- 1) ВИДОМ _____
_____ реагирующих веществ
- 2) _____ состояниями
- 3) _____

25.08.2008

28

Агрегатное состояние:

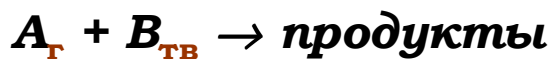
1. Для газов - важны _____



$$V = k \cdot C_A^{\alpha} \cdot C_B^{\beta} = \underline{\hspace{2cm}}$$

2. Для растворов - среда (_____),
_____ постоянная

3. Для твёрдых веществ- _____



$$V = \underline{\hspace{1cm}} = \underline{\hspace{1cm}}$$

25.08.2008

29

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ на СХР. ЭНЕРГИЯ АКТИВАЦИИ

25.08.2008

30

Эмпирическое Правило Вант-Гоффа

$$\frac{V_2}{V_1} = \gamma^{\frac{T_2 - T_1}{10}}$$

γ - температурный коэффициент СХР
 $\lg \gamma =$

При _____ Т на
каждые **10° СХР**
_____ в _____ раза

25.08.2008

31

Эмпирическое Правило Вант-Гоффа

✓ **Правило** _____
интервале T (ΔT __ 100 °C)

✓ **γ** _____

✓ **Не имеет** _____

Теория активных столкновений

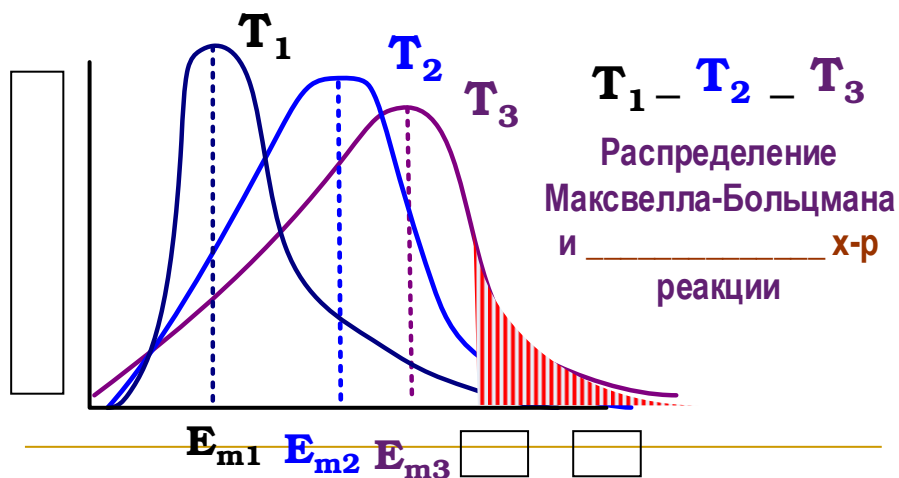
1. Для хим. взаимодействия необходимо (но не достаточно) _____

2. Доля « _____ »

столкновений зависит от:

- _____, которой обладают молекулы
- _____ столкновений
- _____ реагирующих молекул

Энергия активации — _____ энергия,
 которой должны обладать _____
 для протекания хим.реакции



25.08.2008

34

Уравнение _____

$$k = \frac{A}{T} e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

k – константа СХР,

k_0 – _____
 множитель

$R = 8,31$ Дж/(моль*К)

T – температура, _____

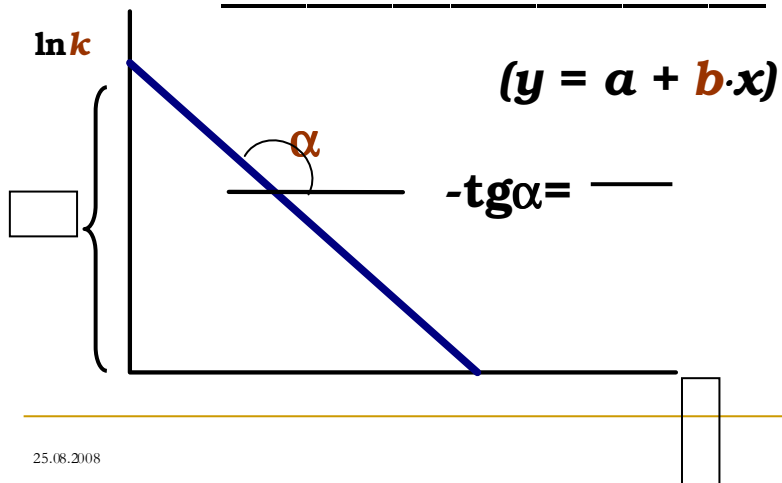
E_a – _____, Дж/моль

25.08.2008

35

Логарифмическая форма уравнения Аррениуса

$$\ln k = \underline{\hspace{2cm}}$$



25.08.2008

36

Для двух температур

$$k_1 = \underline{\hspace{2cm}} \quad k_2 = \underline{\hspace{2cm}}$$

$$\frac{k_2}{k_1} = \frac{\underline{\hspace{2cm}}}{\underline{\hspace{2cm}}} = \underline{\hspace{2cm}}$$

$$E_a = \underline{\hspace{2cm}}$$

25.08.2008

37

Теория активированного комплекса. Связь кинетики и ТМД

Активированный комплекс (АК) –

соединение реагентов:

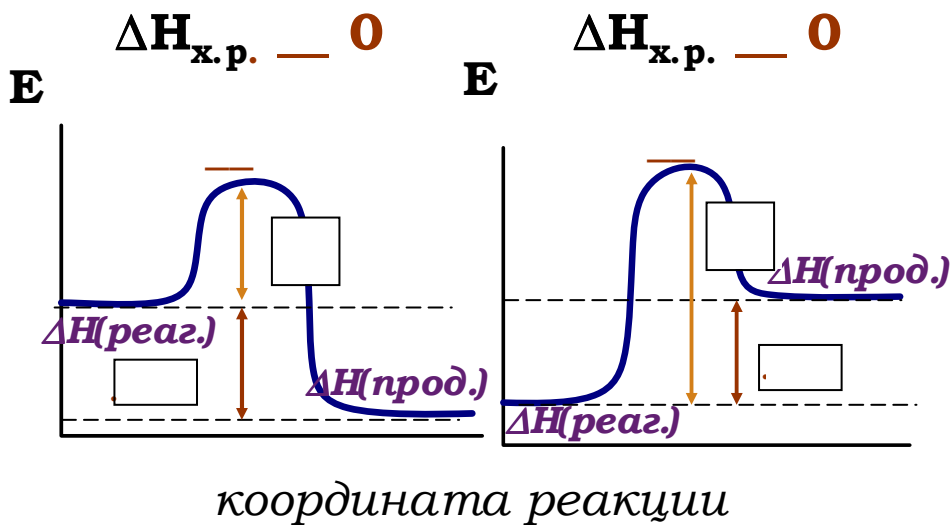


$$E_a = \Delta H_{\text{АК}} - \text{_____ АК}$$

$$\Delta H_{\text{х.р.}} = \text{_____}$$

25.08.2008

38



25.08.2008

39

Катализ

25.08.2008

40

- **Катализ** – это явление _____
реакции под действием веществ не
расходующихся в реакции
- **Каталитические реакции** – это реакции, в
которых _____ при
неизменных _____

25.08.2008

41

- **Катализатор** – это вещество, которое многократно участвует в _____ реакции, но выходит из нее химически _____
- **E_a** промежуточных стадий с участием катализатора _____, чем **E_a** р-ции без катализатора

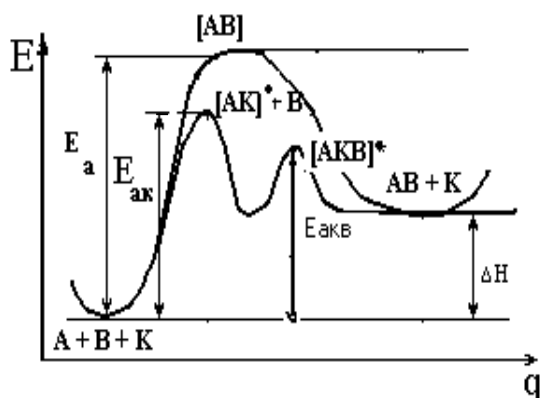
25.08.2008

42

Энергетический профиль реакции

$A + B = AB$ (без катализатора)

$A + B + K \rightarrow [AK] + B \rightarrow [AKB] \rightarrow AB + K$ (с кат.)



25.08.2008

43

$2\text{HI} = \text{H}_2 + \text{I}_2$; $E_a = 184$ кДж/моль
 $E_{\text{ак}} = 69$ кДж/моль в присутствии
кат-ра (Pt), тогда при 500 К:

$$\frac{k'}{k} =$$

25.08.2008

44

Гомогенный катализ

(катализатор и реагент образуют одну фазу)

Пример: получение SO_3 окислением SO_2 в
технологии получения H_2SO_4 Катализатор NO_2 ;
все вещества – газы



25.08.2008

45

Гетерогенный катализ

- Получение H_2SO_4 с помощью Pt кат-ра



- Эффективность гетерогенных кат-ров _____, чем гомогенных
- Скорость реакций в гомогенном катализе зависит от _____ кат-ра, а для гетерогенного - от его _____

Литература:

- **Савельев Г.Г., Смолова Л.М. Общая химия, Томск, 2005, С. 112 - 121.**
- **Карапетьянц М.Х., Дракин С.И. ОНХ, М. 1981 (и далее), С.212-227**
- **Семенов И.Н., Перфилова И.Л.. Химия, 2000, С. 180 - 194.**