

Глоссарий

по дисциплине «Химические реакторы»

АВТОКАТАЛИЗ - ускорение реакции, обусловленное накоплением конечного или промежуточного продукта, обладающего каталитическим действием в данной реакции.

АБСОРБЦИЯ газов (лат. absorptio, от absorbeo-поглощаю) - объемное поглощение газов и паров жидкостью (абсорбентом) с образованием раствора.

АРРЕНИУСА УРАВНЕНИЕ - выражает зависимость константы скорости химической реакции k от температуры T : $k = A \cdot \exp(-E/RT)$; E — энергия активации; R — газовая постоянная. Предложено С. Аррениусом в 1889.

БЕЗГРАДИЕНТНЫЙ РЕАКТОР - лаб. прибор для измерения скоростей хим. реакций; проточный реактор, в котором концентрации реагентов и температура одинаковы по всему реакционному пространству.

БЕЗОТХОДНЫЕ ПРОИЗВОДСТВА в хим. технологии (безотходная технология)-- осуществляются по оптимальным технологическим схемам (см. Оптимизация) с замкнутыми (рециркуляционными) материальными и энергетическими потоками.

ГЕТЕРОГЕННЫЕ РЕАКЦИИ - химические реакции между веществами, находящимися в разных фазах (разных агрегатных состояниях вещества). Например, реакция горения угля - гетерогенная реакция между твердым углеродом и газообразным кислородом. Реакция взаимодействия цинка с соляной кислотой - гетерогенная реакция между твердым цинком и раствором HCl. Гетерогенные реакции протекают не в объеме, а на границе раздела фаз - в этом их принципиальное отличие от ГОМОГЕННЫХ реакций.

ГЕТЕРОГЕННАЯ СИСТЕМА - макроскопически неоднородная физико-химическая система, состоит из различных по своим свойствам частей, разграниченных поверхностями раздела.

ГЕТЕРОГЕННЫЙ КАТАЛИЗ (контактный катализ)-- изменение скорости хим. реакции при воздействии катализаторов, образующих самостоятельную фазу и отделенных от реагирующих веществ границей раздела.

ГОМОГЕННЫЕ РЕАКЦИИ - химические реакции, протекающие в однородной фазе. Обычно это реакции либо в газовой фазе (реакции между газами), либо в жидкой фазе (реакции между растворами). Гомогенные реакции протекают во всем объеме реакционного сосуда - в этом их принципиальное отличие от ГЕТЕРОГЕННЫХ реакций.

ГОМОГЕННАЯ СИСТЕМА (от греч. *homogenes* — однородный) - система, химический состав и физические свойства которой во всех частях одинаковы или меняются непрерывно, без скачков (между частями системы нет поверхностей раздела).

ДИСПЕРСНОСТЬ - характеристика размера частиц в дисперсных системах. Мера дисперсности — отношение общей поверхности всех частиц к их суммарному объему или массе. Полидисперсность определяется функцией распределения частиц по размерам или массам.

ДИСПЕРСНЫЕ СИСТЕМЫ - состоят из множества частиц какого-либо тела (дисперсная фаза), распределенных в однородной среде (дисперсионной среде). Характеризуются сильно развитой поверхностью раздела между фазами. По размерам частиц (дисперсности) различают грубодисперсные системы и высокодисперсные, или коллоидные системы. В виде дисперсных систем существует большинство реальных тел окружающего нас мира: грунты и почвы, ткани живых организмов, многие технические материалы, пищевые продукты и др.

ДИФФУЗИЯ (от лат. *diffusio* — распространение, растекание, рассеивание) - движение частиц среды, приводящее к переносу вещества и выравниванию концентраций или к установлению равновесного распределения концентраций частиц данного сорта в среде. В отсутствие макроскопического движения среды (напр., конвекции) диффузия молекул (атомов) определяется их тепловым движением (т. н. молекулярная диффузия). В неоднородной системе (газ, жидкость) при молекулярной диффузии в отсутствие внешних воздействий диффузионный поток (поток массы) пропорционален градиенту его концентрации. Коэффициент пропорциональности называется коэффициентом диффузии. В физике, кроме диффузии молекул (атомов), рассматривают диффузию электронов проводимости, дырок, нейтронов и других частиц.

ЖИДКОСТЬ - агрегатное состояние вещества, сочетающее в себе черты твердого состояния (сохранение объема, определенная прочность на разрыв) и газообразного (изменчивость формы). Для жидкости характерны ближний порядок в расположении частиц (молекул, атомов) и малое различие в кинетической энергии теплового движения молекул и их потенциальной энергии взаимодействия. Тепловое движение молекул жидкости состоит из колебаний около положений равновесия и сравнительно редких перескоков из одного равновесного положения в другое, с этим связана текучесть жидкости.

ЗАКОН АВОГАДРО - равные объемы любых газов (при одинаковых температуре и давлении) содержат равное число молекул. 1 МОЛЬ любого газа при нормальных условиях занимает объем 22,4 л.

ИНГИБИТОРЫ (от лат. *inhibeo* — удерживаю) - вещества, снижающие скорость химических, в т. ч. ферментативных, реакций или подавляющие их. Применяют для предотвращения или замедления нежелательных процессов: коррозии металлов, старения полимеров, окисления топлив и смазочных масел, пищевых жиров и др. Ингибиторы ферментов используют для изучения механизма их действия, для лечения нарушений обмена веществ, а также в качестве пестицидов.

КАТАЛИЗ (от греч. *katalysis* — разрушение) - ускорение химической реакции в присутствии веществ — катализаторов, которые взаимодействуют с реагентами, но в реакции не расходуются и не входят в состав продуктов. При гомогенном катализе исходные реагенты и катализатор находятся в одной фазе (газовой или жидкой), при гетерогенном — газообразные или жидкие реагенты взаимодействуют на поверхности твердого катализатора. Катализ обуславливает

высокие скорости реакций при небольших температурах; предпочтительно образование определенного продукта из ряда возможных. Каталитические реакции являются основой многих химико-технологических процессов (напр., производства серной кислоты, некоторых полимеров, аммиака). Большинство процессов, происходящих в живых организмах, также являются каталитическими (ферментативными).

КАТАЛИЗАТОРЫ - вещества, способные ускорять химические реакции, сами оставаясь при этом неизменными.

КАТАЛИЗАТОРЫ ГИДРИРОВАНИЯ - вещества, ускоряющие присоединение водорода к ненасыщенным органическим соединениям.

КАТАЛИЗАТОРЫ ДЕГИДРИРОВАНИЯ - ускоряют отщепление водорода от орг. соединений.

КАТАЛИЗАТОРЫ ОКИСЛЕНИЯ - ускоряют реакции окисления молекулярным кислородом. Используются в процессах парциального (неполного) и глубокого окисления химических соединений.

КАТАЛИЗАТОРЫ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ - вещества, возбуждающие полимеризацию.

КАТАЛИЗАТОРЫ ПРОЦЕССОВ НЕФТЕПЕРЕРАБОТКИ - ускоряют каталитический крекинг, гидрообессеривание, гидрокрекинг, гидродеароматизацию, риформинг и др.

КАТАЛИЗАТОРЫ СИНТЕЗА НА ОСНОВЕ СО И Н₂ - применяются для получения из смеси СО и Н₂ углеводородов и органических соединений, содержащих функциональные группы.

КАТАЛИТИЧЕСКИЙ КРЕКИНГ - термокаталитическая переработка нефтяного сырья с целью получения продуктов меньшей молекулярной массы - компонентов высокооктановых бензинов, легкого газойля, углеводородных газов.

КАТАЛИТИЧЕСКИЙ РЕФОРМИНГ - каталитическая переработка бензиновых фракций (в основном прямогонных) под давлением Н₂ с целью получения высокооктановых автомобильных бензинов, ароматических углеводородов.

КИНЕТИКА ХИМИЧЕСКАЯ - раздел физической химии, учение о скоростях и механизмах химических реакций. Кинетика химическая — научная основа создания новых и совершенствования существующих процессов химической технологии. Методы кинетики химической используются в биологии и др. областях естествознания. См. также Макрокинетика.

КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ -

1) в статистической физике — уравнение для одночастичной функции распределения системы многих частиц (дающей среднее число частиц с определенными значениями импульсов и координат), описывающее эволюцию системы во времени. Кинетическое уравнение для газа было впервые предложено в 1872 Л. Больцманом и носит его имя.

2) В кинетике химической — математическое выражение, устанавливающее зависимость скорости химической реакции от концентраций веществ в реагирующей системе.

КЛАПЕЙРОНА-МЕНДЕЛЕЕВА УРАВНЕНИЕ: $PV = nRT$.

В этом уравнении: n - число молей газа; P - давление газа (*атм*); V - объем газа (в литрах); T - температура газа (в кельвинах); R - газовая постоянная (0,0821 л·*атм*/моль·К). Если вычисления проводят в системе СИ, то объем измеряется в м³, а давление в Па (паскалях). В последнем случае газовая постоянная $R = 8,314$ Дж/К·моль.

КОНСТАНТА СКОРОСТИ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ - ее основная кинетическая характеристика; коэффициент пропорциональности в кинетическом уравнении, связывающем скорость реакции с концентрациями реагирующих веществ и их стехиометрическими коэффициентами. Для мономолекулярных реакций константа скорости имеет размерность с⁻¹, для биомолекулярных — л/моль·с. Зависимость константы скорости от температуры выражается Аррениуса уравнением.

КОНЦЕНТРАЦИЯ - относительное количество какого-либо вещества в растворе. Например, ПРОЦЕНТНАЯ КОНЦЕНТРАЦИЯ - то же, что и МАССОВАЯ ДОЛЯ РАСТВОРЕННОГО ВЕЩЕСТВА - отношение массы растворенного вещества к массе раствора, выраженное в процентах. МОЛЯРНАЯ КОНЦЕНТРАЦИЯ - отношение числа молей растворенного вещества к общему объему раствора (единица - моль/л).

КОНЦЕНТРАЦИЯ ВЕЩЕСТВА - отношение числа частиц компонента системы (смеси, раствора, сплава), его количества (молярная концентрация) или массы (массовая концентрация) к объему системы. Единицы измерения — соответственно м⁻³, моль/м³ или кг/м³. На практике часто используют безразмерные величины — массовую, молярную или объемную доли, равные отношению массы, количества или объема какого-либо компонента системы к ее массе, количеству или объему соответственно. Выражают их в долях единицы, напр. в сотых (процент, %), тысячных (промилле, ‰), миллионных (млн.⁻¹) и т. д.

МАКРОКИНЕТИКА (макроскопическая кинетика) - изучает кинетические закономерности химических реакций, которые сопровождаются одновременными протекающими в системе процессами диффузии, теплопереноса и др. Знание макрокинетических закономерностей в реальных условиях протекания особенно важно для горения, гетерогенного катализа, электрохимических процессов и др.

МОЛЬ - количество вещества, равное $6,022 \cdot 10^{23}$ структурных единиц данного вещества: молекул (если вещество состоит из молекул), атомов (если это атомарное вещество), ионов (если вещество является ионным соединением). Число $6,022 \cdot 10^{23}$ называется постоянной Авогадро или числом Авогадро.

МОЛЯРНАЯ МАССА - масса одного моля вещества в граммах называется молярной массой вещества или грамм-молем (размерность г/моль). Численное выражение молярной массы (грамм-моля) в граммах совпадает с молекулярным весом (или атомным, если вещество состоит из атомов) в единицах а.е.м.

НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ - химически индивидуальные вещества переменного состава, не отвечающего стехиометрическим соотношениям. Нестехиометрическими соединениями являются вследствие особенностей своей структуры некоторые кристаллические вещества (гидриды, оксиды, сульфиды, металлиды и др.). К нестехиометрическим соединениям относятся полевые шпаты, шпинели и другие минералы.

НОРМАЛЬНЫМИ УСЛОВИЯМИ (н.у.) называют температуру 0 °С (273 К) и давление 1 атм (760 мм ртутного столба или 101 325 Па). Не путать со СТАНДАРТНЫМИ УСЛОВИЯМИ!

ОБРАТИМЫЕ И НЕОБРАТИМЫЕ ПРОЦЕССЫ - пути изменения состояния термодинамической системы.

ОПТИМИЗАЦИЯ (от лат. optimus-наилучший) в химической технологии - под О. обычно понимают целенаправленную деятельность, заключающуюся в получении наилучших результатов при соответствующих условиях.

ПЕРЕГОНКА - способ очистки веществ (как правило, жидкостей) путем их испарения в одном сосуде и конденсации паров в другом сосуде. Перегонкой можно разделять жидкости, если их температуры кипения отличаются.

ПОРЯДОК РЕАКЦИИ - по данному веществу - показатель степени при концентрации этого вещества в кинетическом уравнении. Сумма порядков по всем веществам называется общим или суммарным порядком реакции. Например, для реакции $2\text{NO} + \text{O}_2 = 2\text{NO}_2$: кинетическое уравнение $v = k[\text{NO}]^2[\text{O}_2]$; второй порядок по NO, первый порядок по O₂, общий (суммарный) порядок реакции 3. Для элементарных реакций порядок - целочисленная величина, совпадающая с МОЛЕКУЛЯРНОСТЬЮ РЕАКЦИИ. Для других реакций порядки определяются только экспериментально, причем они могут иметь как целочисленное, так и дробные (и даже нулевое) значение.

ПРОМОТОРЫ - вещества, сами по себе не являющиеся КАТАЛИЗАТОРАМИ данной реакции, но усиливающие действие основного катализатора.

РАВНОВЕСИЕ - состояние системы, при котором параметры не зависят от времени.

РЕАГЕНТЫ - исходные вещества в химической реакции. Формулы реагентов записываются всегда в левой части уравнения химической реакции.

РЕАКЦИИ ХИМИЧЕСКИЕ - превращения одних веществ в другие, отличные по химическому составу и (или) строению. Характеризуются стехиометрическим соотношением участвующих в них веществ, степенью превращения, константами скорости и равновесия, энергией активации, тепловым эффектом. Химические реакции классифицируют по числу молекул, участвующих в элементарном акте (моно-, бимолекулярные), кинетическому механизму (последовательные, параллельные, сопряженные), характеру химического процесса (разложение, окисление, полимеризация и др.), типам частиц, участвующих в химических реакциях (ионные, радикальные), фазовому состоянию реагирующей системы

(газо-, жидко- и твердофазные). Гомогенные химические реакции протекают в объеме фазы, гетерогенные — на поверхности раздела фаз.

РЕАКТОРЫ ХИМИЧЕСКИЕ (от лат. ге- приставка, означающая обратное действие, и астор - приводящий в действие, действующий) - промышленные аппараты для осуществления хим. реакций.

СКОРОСТЬ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ - количество вещества, вступающего в реакцию или образующегося при реакции за единицу времени в единице объема системы. Имеет размерность моль/л сек⁻¹.

СОРБЦИЯ (от лат. sorbeo — поглощаю) - поглощение твердым телом или жидкостью какого-либо вещества из окружающей среды. Основные разновидности сорбции — адсорбция, абсорбция, хемосорбция. Поглощающее тело называется сорбентом, поглощаемое — сорбтивом (сорбатом). Важнейшие твердые сорбенты, способные к регенерации и применяемые в технике, — активные угли, силикагель, минералы цеолиты, иониты. Сорбция в гидрометаллургии — поглощение ценных компонентов (U, Au, Mo) из растворов или пульп при выщелачивании руд и концентратов.

СТАНДАРТНАЯ ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ ВЕЩЕСТВА - тепловой эффект реакции образования данного вещества из элементов при определенных условиях. См. также ТЕПЛОВОЙ ЭФФЕКТ, СТАНДАРТНЫЕ УСЛОВИЯ и ЭНТАЛЬПИЯ.

СТАНДАРТНЫЕ УСЛОВИЯ, СТАНДАРТНЫЕ СОСТОЯНИЯ (не путать с НОРМАЛЬНЫМИ УСЛОВИЯМИ!) - состояние вещества при 25 °С (298 К) и 1 атм (1,01·10⁵ Па), а для простых веществ, кроме того, состояние в наиболее устойчивой при этих условиях АЛЛОТРОПНОЙ МОДИФИКАЦИИ. Например, для углерода стандартным состоянием является графит, но не алмаз. От простых веществ в их стандартном состоянии отсчитывают СТАНДАРТНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ ЭНТАЛЬПИИ (ΔH_{298}°) при образовании сложного вещества.

СТЕПЕНЬ ОКИСЛЕНИЯ - при образовании химических связей между атомами электроны частично передаются от менее электроноакцепторных атомов к более электроноакцепторным атомам. Количество отданных или принятых атомом электронов называется степенью окисления атома в молекуле. При связывании разных атомов степень окисления равна заряду, который приобрел бы атом в этом соединении, если бы оно могло состоять из одних ионов. Описывает состояние атома в молекуле.

СТЕХИОМЕТРИЯ (от греч. stoicheion — первоначало, элемент и ...метрия) - представление о количественных соотношениях между массами веществ, вступающих в химическую реакцию. Включает правила составления химических формул и уравнений. Основывается на законах Авогадро, Гей-Люссака, кратных отношений, сохранения массы, эквивалентов.

СТРУКТУРНЫЕ ФОРМУЛЫ - изображение молекулы, в котором показан порядок связывания атомов между собой. Химические связи в таких формулах обозначаются черточками. Например, структурные формулы: Cl-Ca-Cl (молекула CaCl₂), O=C=O (молекула CO₂) и т.д.

ТЕПЛОВОЙ ЭФФЕКТ РЕАКЦИИ - теплота, выделенная или поглощенная при протекании химической реакции. Обычно обозначается символами Q или ΔE . При постоянном давлении ТЕПЛОВОЙ ЭФФЕКТ РЕАКЦИИ (ΔE) равен изменению ЭНТАЛЬПИИ (ΔH). В термодинамической системе знаков положительным считается тепловой эффект экзотермической реакции (в которой тепло выделяется "наружу"). В термодинамической системе знаков тепловой эффект экзотермической реакции считается отрицательным ($Q = -\Delta H$).

ТЕПЛООБМЕН - передача энергии в форме теплоты от тела с большей температурой телу с меньшей температурой.

ТЕПЛОТА ОБРАЗОВАНИЯ - тепловой эффект реакции образования химических соединений из простых веществ в стандартном состоянии. Теплоты образования, приводимые в термодинамических справочниках, используют для расчетов тепловых эффектов любых реакций с помощью законов Гесса и уравнения Кирхгофа.

ТЕРМОДИНАМИКА ХИМИЧЕСКАЯ - раздел физической химии, рассматривающий термодинамические явления в области химии, а также зависимости термодинамических свойств веществ от их состава и агрегатного состояния. Т. х. тесно связана с термохимией, учением о равновесии химическом и учением о растворах (в частности, электролитов), теорией электродных потенциалов, с термодинамикой поверхностных явлений.

ТИПЫ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ:

- **СОЕДИНЕНИЯ** - когда два (или более) вещества-реагента соединяются в одно, более сложное вещество;
- **РАЗЛОЖЕНИЯ** - когда одно сложное исходное вещество разлагается на два или несколько более простых;
- **ОБМЕНА** - когда реагенты обмениваются между собой атомами или целыми составными частями своих молекул.
- **ЗАМЕЩЕНИЯ** - реакции обмена, в которых участвует какое-либо простое вещество, замещающее один из элементов в сложном веществе;
- **НЕЙТРАЛИЗАЦИИ** - (важная разновидность реакций обмена): реакции обмена между кислотой и основанием, в результате которых образуется соль и вода;
- **ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫЕ** - реакции всех перечисленных выше типов, в которых происходит изменение степени окисления каких-либо атомов в реагирующих молекулах.

УРАВНЕНИЯ ХИМИЧЕСКИЕ - запись химической реакции при помощи химических формул и численных коэффициентов. В левой части уравнений химических записываются формулы исходных веществ, в правой — продуктов реакции. Коэффициенты перед формулами (т. н. стехиометрические) подбираются так, чтобы сумма атомов одних и тех же элементов была одинаковой в левой и правой частях уравнения.

ФИЗИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ - явления, не сопровождающиеся превращением одних веществ в другие путем разрыва и образования связей в их молекулах.

ФОРМУЛА ХИМИЧЕСКАЯ - изображение состава и строения молекул с помощью знаков химических. Различают эмпирические, или брутто-формулы (показывают общее число атомов в молекуле), рациональные (в них выделяют группы атомов, характерные для данного класса соединений) и структурные (характеризуют расположение атомов в молекуле). Так, для этилового спирта брутто-формула C_2H_6O , рациональная C_2H_5OH , структурная.

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ - наука о процессах, методах и средствах массовой химической переработки сырья и промежуточных продуктов. Химическая технология - наука о химическом производстве. Само слово "технология" состоит из греческих слов: "технос" - "искусство" или "ремесло" и "логос" - "наука".

ХИМИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ - явления, при которых одни вещества, обладающие определенным составом и свойствами, превращаются в другие вещества - с другим составом и другими свойствами. При этом в составе атомных ядер изменений не происходит. Химические явления называют иначе химическими реакциями.

ХИМИЧЕСКОЕ РАВНОВЕСИЕ – термодинамическое равновесие в системе, между компонентами которой происходят химические реакции.

ХИМИЧЕСКОГО РАВНОВЕСИЯ КОНСТАНТА - величина, выражающая соотношение между концентрациями (парциальными давлениями, летучестями, активностями) компонентов системы в состоянии химического равновесия. Численные значения химического равновесия константы позволяют рассчитывать выход продуктов реакции в данных условиях по начальным концентрациям реагирующих веществ.

ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ СКОРОСТЬ - основное понятие химической кинетики. Для простых гомогенных реакций скорость химической реакции измеряют по изменению числа молей прореагировавшего вещества (при постоянном объеме системы) или по изменению концентрации любого из исходных веществ или продуктов реакции (если объем системы изменяется). Для сложных реакций скорости образования (расходования) всех веществ, участвующих в элементарных стадиях, взаимосвязаны.

ЧИСЛО АВОГАДРО - $6,022 \cdot 10^{23}$

ЭНЕРГИЯ АКТИВАЦИИ В ХИМИИ - наименьшая энергия, которой должна обладать частица (атом, ион, радикал) для того, чтобы произошла химическая реакция. Одна из основных величин, определяющих скорость реакции при данной температуре (см. Аррениуса уравнение).

ЭКЗОТЕРМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ (от греческого *exo* - вне, снаружи) - химические реакции, протекающие с выделением тепла.

ЭКОЛОГИЯ (от греческого *oikos* - пребывание и *logos* - слово, понятие, учение) - наука, изучающая взаимоотношения живых организмов с окружающей средой.

ЭНДОТЕРМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ (от греческого endon - внутри) - химические реакции, протекающие с поглощением тепла.

ЭНЕРГИЯ АКТИВАЦИИ (E_a , иногда обозначается как ΔE^\ddagger) - это та дополнительная энергия (к средней энергии E сталкивающихся частиц), которая необходима, чтобы столкновение привело к химической реакции. Энергию активации иногда называют также энергетическим барьером. Каждая химическая реакция имеет свою энергию активации. Значения E_a для реакций между нейтральными молекулами составляют, как правило, от 80 до 240 кДж/моль. На величину E_a не влияет температура, но может повлиять присутствие КАТАЛИЗАТОРА.

ЭНТАЛЬПИЯ - "теплосодержание" реагирующих веществ. Обозначается как ΔH . При постоянном давлении (если реакция идет не в замкнутом сосуде) изменение энтальпии в процессе химической реакции равно её **ТЕПЛОВОМУ ЭФФЕКТУ**.

ЯДЫ КАТАЛИТИЧЕСКИЕ - вещества, воздействие которых на катализаторы приводит к снижению их активности вплоть до полной дезактивации (т. наз. отравление катализаторов).