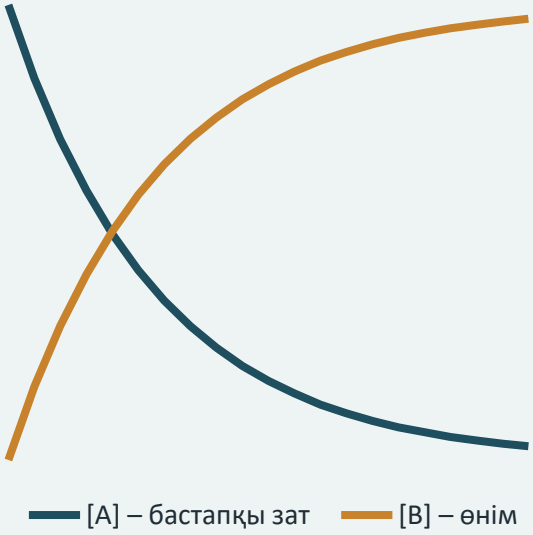
Пән: «Физикалық химия 2» (FH 3212)
Білім беру бағдарламасы: 6B05301 – Химия

ДӘРІС №1

Химиялық кинетиканың негізгі ұғымдары

Реакция жылдамдығы · механизм · массалар әрекеттесу заңы · реакция реті мен молекулалығы



A → B: кинетикалық қисықтар

2026–2027 оқу жылы

КІРІСПЕ

Дәріс жоспары

1. **Химиялық кинетиканың пәні мен міндеттері**
   термодинамикамен салыстыру
2. **Реакция механизмі және шекті саты**
   тізбекті реакция мысалы
3. **Реакциялардың жіктелуі**
   элементар, күрделі; молекулалық
4. **Химиялық реакцияның жылдамдығы**
   орташа және лездік; кинетикалық қисық
5. **Массалар әрекеттесу заңы**
   жылдамдық константасы және оның бірліктері
6. **Реакция реті мен молекулалығы**
   айырмашылықтары, талдау мысалы

Дәрістің мақсаты және күтілетін нәтижелер

Мақсаты

- Химиялық кинетиканың негізгі ұғымдары мен заңдылықтарын қалыптастыру.
- Кинетикалық және термодинамикалық тәсілдердің айырмашылығын көрсету.
- Жылдамдық, жылдамдық константасы, реакция реті мен молекулалығының мәнін түсіндіру.

ОН 1

Химиялық кинетика мен катализдің іргелі заңдылықтарын түсіндіру және қарапайым реакциялардың жылдамдық параметрлерін есептеу.

ЖИ 1.1

Массалар әрекеттесу заңын, жылдамдық константасының физикалық мәнін және өлшем бірліктерін сипаттайды.

ЖИ 1.2

Реакцияның реттілігі мен молекулалығы ұғымдарының айырмашылығын тұжырымдайды.

Термодинамика мен кинетика: екі түрлі сұрақ

Химиялық термодинамика

Реакция жүре ме? Қай күйде аяқталады?

- Тепе-теңдік күйді қарастырады – уақыт жоқ
- Функциялар бастапқы және соңғы күйге тәуелді
- Негізгі шама: $K_a = a_B / a_A$

Химиялық кинетика

Реакция қаншалықты жылдам жүреді? Қандай жолмен?

- Уақыт бойынша өзгеретін жүйелерді қарастырады
- Жылдамдық реагенттердің күйіне тәуелді
- Негізгі шама: $w = k \cdot C_A$

Мысал: C (алмаз) → C (графит), $\Delta G^\circ_{298} \approx -2{,}9$ кДж/моль < 0. Термодинамика бойынша процесс мүмкін, бірақ оның жылдамдығы іс жүзінде нөлге тең. Мүмкін болу ≠ жылдам жүру.

Химиялық кинетика дегеніміз не?

Химиялық кинетика – химиялық реакциялардың уақыт бойынша жүру заңдылықтары мен механизмі туралы ғылым.

Уақыт бойынша заңдылықтар

Реагенттер мен өнімдер концентрациясы уақыт өтуімен қалай өзгереді

Жылдамдық пен жағдай байланысы

Температура, қысым, орта, катализатор жылдамдыққа қалай әсер етеді

Бағыт пен механизм

Реакция қандай аралық сатылар арқылы жүреді, неге бір өнім басым болады

Зерттеу нысаны: белсенді бөлшектердің – бос атомдар, радикалдар, иондар, радикал-иондар, қозған молекулалардың – қатысуымен жүретін қарапайым реакциялар.

Кинетиканың міндеттері: тура және кері есеп

Тура есеп

Механизм және k белгілі → Кинетикалық теңдеу құру → **C(t) қисықтарын есептеу**

Кері есеп

Тәжірибе: C(t) өлшеу → n, k, E_a анықтау → **Механизмді болжау**

Реакция механизмін және жылдамдыққа әсер ететін факторларды білу процесті басқаруға – жылдамдатуға немесе тежеуге – мүмкіндік береді.

Реакция механизмі: сатылар тізбегі

Реакция механизмі – бастапқы заттардың өнімдерге стехиометриялық түрленуін жүзеге асыратын элементар сатылардың жиынтығы.

1. Тізбектің туындауы

$$Cl_2 \rightarrow 2Cl\bullet$$

→

2. Тізбектің өсуі

$$Cl\bullet + H_2 \rightarrow HCl + H\bullet$$

$$H\bullet + Cl_2 \rightarrow HCl + Cl\bullet$$

→

3. Тізбектің үзілуі

$$Cl\bullet + Cl\bullet \rightarrow Cl_2$$

↻ өсу сатылары көп рет қайталанады: Cl• радикалы қайта түзіледі

Жиынтық теңдеу: $H_2 + Cl_2 = 2HCl$ – механизм туралы ештеңе айтпайды

Бір типті теңдеу – әртүрлі механизм

$H_2 + Cl_2 = 2HCl$

радикалды тізбекті механизм

1. $Cl_2 \rightarrow 2Cl\bullet$
2. $Cl\bullet + H_2 \rightarrow HCl + H\bullet$
3. $H\bullet + Cl_2 \rightarrow HCl + Cl\bullet$
4. $Cl\bullet + Cl\bullet \rightarrow Cl_2$

$H_2 + I_2 = 2HI$

атомдық механизм

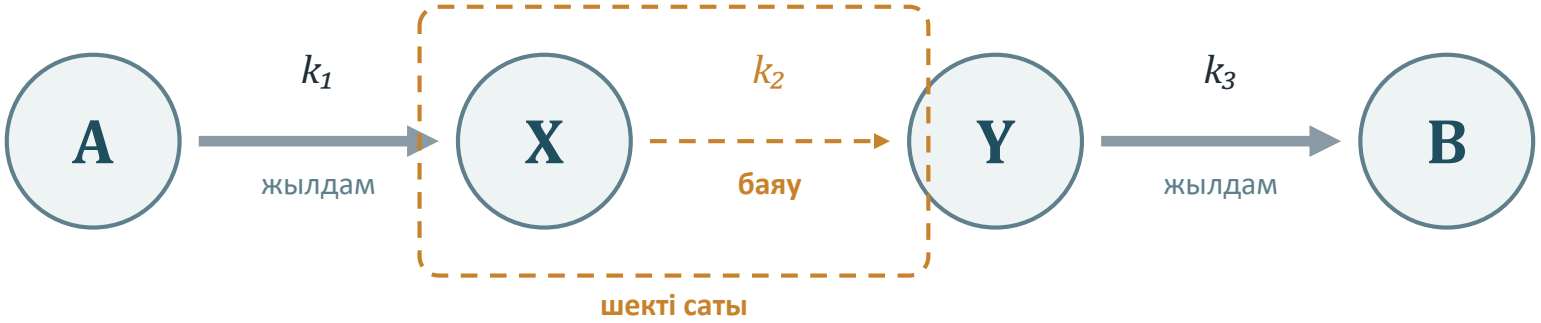
1. $I_2 \rightarrow 2I$
2. $2I \rightarrow I_2$
3. $2I + H_2 \rightarrow 2HI$

1. Химиялық реакция теңдеуі оның механизмін көрсетпейді.

2. Теңдеуге қарап реакцияның жай немесе күрделі екенін анықтау мүмкін емес.

3. Күрделі реакцияның жылдамдығы ең баяу – шекті сатымен анықталады.

Шекті (лимиттеуші) саты



Ереже. Тізбектей жүретін сатылардан тұратын күрделі реакцияның жиынтық жылдамдығы ең баяу сатының жылдамдығына тең: $w \approx w_2$

Аналогия

Конвейердің өнімділігін ең баяу бекет анықтайды – қалған бекеттерді жылдамдату нәтиже бермейді.

Реакциялардың кинетикалық жіктелуі



Элементар, күрделі және жай реакциялар

Элементар реакция

Ауыспалы комплекс арқылы жүретін байланыстың түзілуі немесе үзілуінің бір (жалғыз) акті.

Мысал:

$$CH_3Br + OH^- \rightarrow CH_3OH + Br^-$$

Күрделі реакция

Бір-бірімен байланысқан бірнеше элементар реакциялардың жиынтығы.

Мысал:

$$H_2 + Cl_2 \rightarrow 2HCl$$

(тізбекті механизм)

Жай реакция

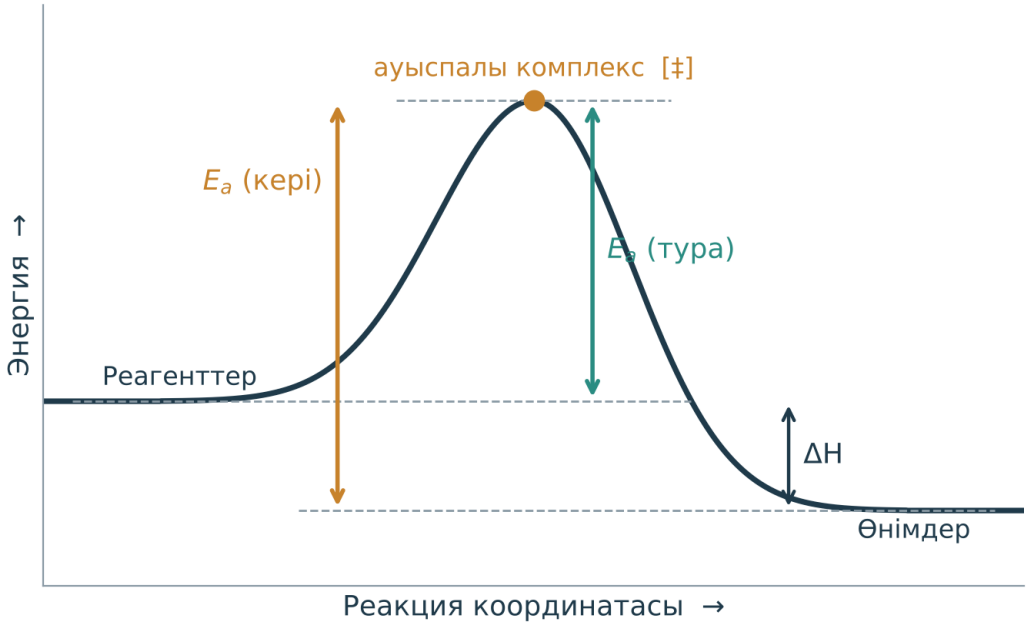
Термодинамикалық тұрақты реагенттері мен өнімдері бар бір сатылы реакция.

Мысал:

$$C_2H_5Br \rightarrow C_2H_4 + HBr$$

$$2NO + O_2 \rightarrow 2NO_2$$

Элементар реакция және ауыспалы комплекс



1 Жақындасу

Реагент бөлшектері соқтығысып, энергия жинайды.

2 Ауыспалы комплекс

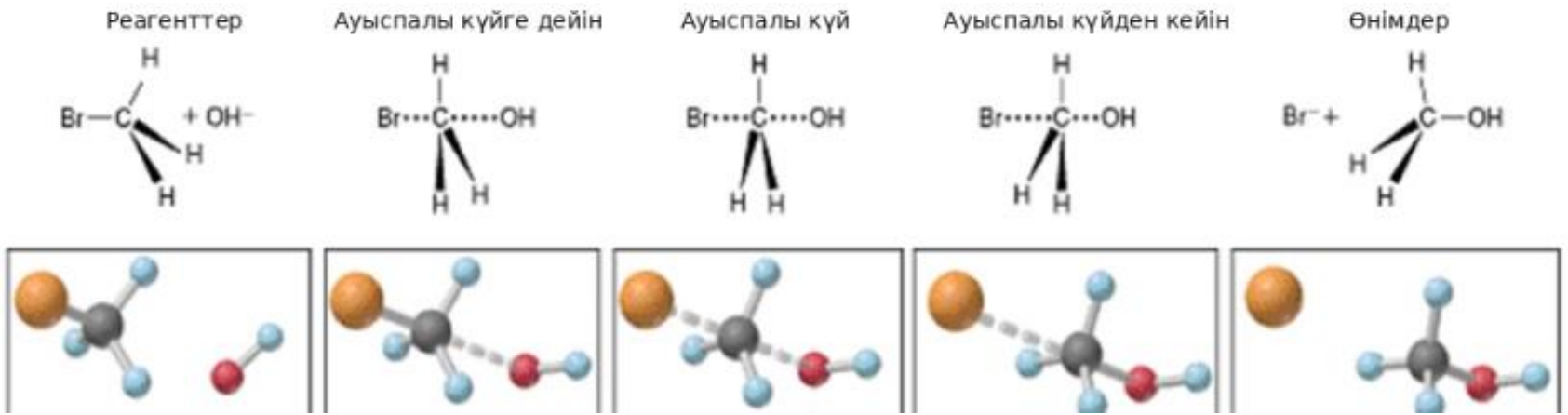
Энергия максимумы: ескі байланыс үзіліп, жаңасы түзіле бастайды.

3 Өнім түзілуі

Комплекс ыдырап, өнімдер түзіледі; энергия бөлінеді.

$$E_a(\text{тура}) - E_a(\text{кері}) = \Delta U \approx \Delta H$$

Ауыспалы күй кезеңдері: $CH_3Br + OH^-$ мысалы



Бір актіде екі бөлшек (CH_3Br және OH^-) әрекеттеседі → бимолекулалық элементар реакция. Ауыспалы күйдің өмір сүру уақыты ≈ 10^{-13} с.

Элементар реакцияның молекулалығы

Молекулалық – элементар реакцияның бір актісіне қатысатын бөлшектер саны: n = 1, 2 немесе 3.

n = 1



Мономолекулалы

$$I_2 \rightarrow I + I$$

n = 2



Бимолекулалы

$$I + I \rightarrow I_2$$

n = 3



Тримолекулалы

$$I + I + H_2 \rightarrow 2HI$$

Фаза және бағыт бойынша жіктелу

Гомогенді

Бір фазада (газ немесе ерітінді) жүреді.

$$2NO_{(г)} + O_{2(г)} \rightarrow 2NO_{2(г)}$$

Гетерогенді

Фазалар шекарасында (бетте) жүреді.

$$Zn_{(к)} + 2HCl_{(ер)} \rightarrow ZnCl_2 + H_2\uparrow$$

Қайтымсыз

Өнімдердің тепе-теңдік концентрациясы бастапқы заттардікінен әлдеқайда жоғары; кері реакцияны ескермеуге болады.

$$BaCl_2 + Na_2SO_4 \rightarrow BaSO_4\downarrow + 2NaCl$$

Қайтымды

Бастапқы заттар мен өнімдердің тепе-теңдік концентрациялары салыстырмалы.

$$H_2 + I_2 \rightleftarrows 2HI$$

Химиялық реакцияның жылдамдығы

Реакцияға түсетін немесе түзілетін зат мөлшерінің уақыт бірлігінде және реакция кеңістігінің бірлігінде өзгеруі:

Жалпы жағдай

$$w = \pm \frac{1}{V} \cdot \frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}t}$$

V = const болғанда

$$w = \pm \frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t}, \text{ моль·л}^{-1}\text{·с}^{-1}$$

Бастапқы зат бойынша

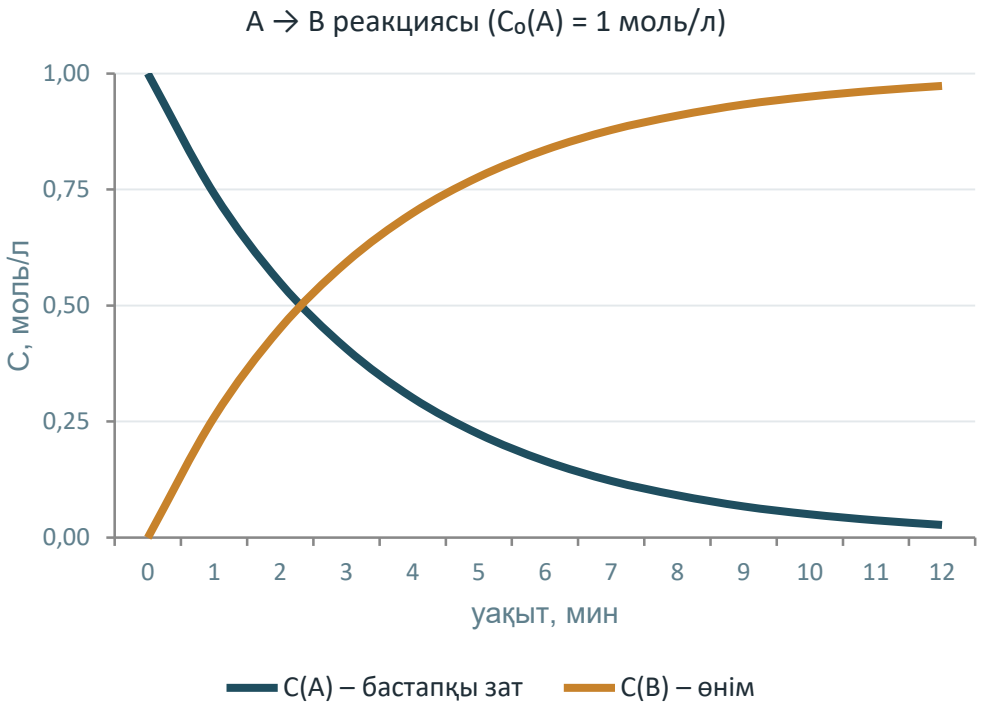
С кемиді, dC/dt < 0 → минус таңбасы қойылады

Өнім бойынша

С өседі, dC/dt > 0 → плюс таңбасы қойылады

Жылдамдық әрқашан оң шама!

Кинетикалық қисықтар



1. **Бастапқы зат** қисығы уақыт өте кемиді (C → 0).
2. **Өнім** қисығы өседі және шекті мәнге ұмтылады.
3. **Көлбеу** – қисықтың берілген нүктедегі көлбеуі сол мезеттегі жылдамдықты көрсетеді.
4. **Уақыт өте** реагенттер азайған сайын жылдамдық төмендейді.

Стехиометрияны ескеру: есеп мысалы

$$aA + bB \rightarrow dD \qquad w = -\frac{1}{a}\frac{dC_A}{dt} = -\frac{1}{b}\frac{dC_B}{dt} = \frac{1}{d}\frac{dC_D}{dt}$$

Есеп. $2NO + O_2 \rightarrow 2NO_2$ реакциясында NO 0,06 моль·л$^{-1}$·с$^{-1}$ жылдамдықпен жұмсалады. Реакция жылдамдығын, O_2 жұмсалу және NO_2 түзілу жылдамдықтарын табыңыз.

1 Реакция жылдамдығы

$w = 0{,}06 / 2 = 0{,}03$

2 O_2 жұмсалуы

$1 \cdot w = 0{,}03$

3 NO_2 түзілуі

$2 \cdot w = 0{,}06$

Барлық жауаптар моль·л$^{-1}$·с$^{-1}$ бірлігінде.

Гомо- және гетерогенді реакциялар жылдамдығы

Гомогенді реакция

Заттардың біреуінің концентрациясының уақыт бірлігіндегі өзгерісі (V = const).

$$w = \pm \frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t}$$

Бірлігі: моль · $л^{-1}$ · $с^{-1}$

кеңістік бірлігі – көлем бірлігіне

Гетерогенді реакция

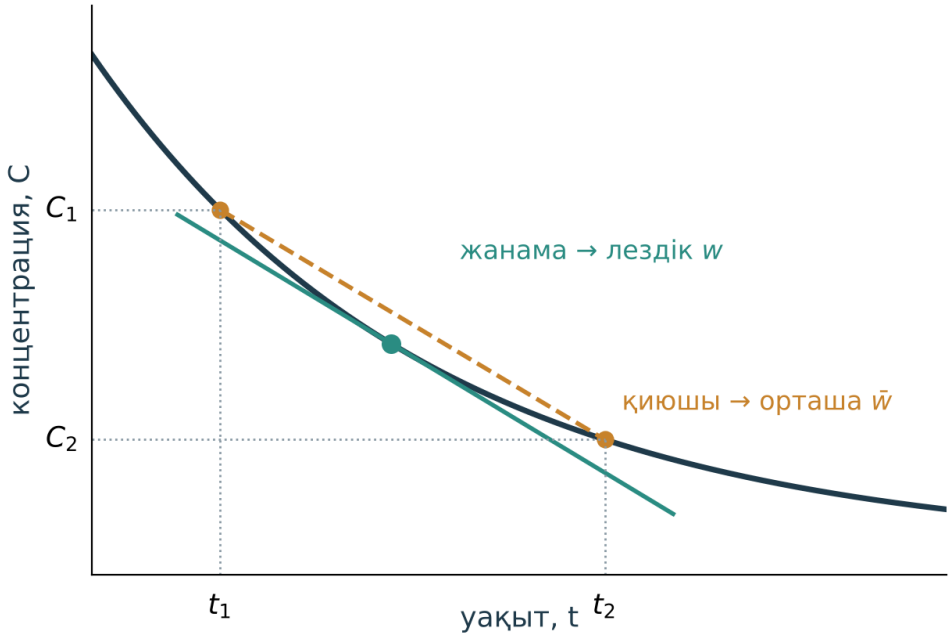
Зат мөлшерінің беттің бірлік ауданына және уақыт бірлігіне келетін өзгерісі.

$$w = \pm \frac{1}{S} \cdot \frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}t}$$

Бірлігі: моль · $м^{-2}$ · $с^{-1}$

кеңістік бірлігі – бет ауданына

Орташа және лездік (шын) жылдамдық



Кинетикада лездік жылдамдық қолданылады.

Орташа жылдамдық (Δt аралығында)

$$\bar{w} = -\frac{C_2 - C_1}{t_2 - t_1} = -\frac{\Delta C}{\Delta t}$$

Лездік жылдамдық (берілген t мезетінде)

$$w = -\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} = \lim_{\Delta t \to 0}\left(-\frac{\Delta C}{\Delta t}\right)$$

Жылдамдыққа әсер ететін факторлар

Заттардың табиғаты мен концентрациясы

Температура

Вант-Гофф, Аррениус

Қысым

газ қатысатын реакциялар

Катализатор

активтену энергиясын төмендетеді

Орта (еріткіш)

ерітінділердегі реакциялар

Жарық қарқындылығы

фотохимиялық реакциялар

Араласу дәрежесі

гетерогенді жүйелер

Массалар әрекеттесу заңы – негізгі постулат

Тұрақты температурада химиялық реакцияның жылдамдығы әрекеттесуші заттар концентрацияларының белгілі бір дәрежелерге шығарылған көбейтіндісіне пропорционал.

К. Гульдберг, П. Вааге, 1867 ж. (Норвегия)

$$n_1\mathrm{A} + n_2\mathrm{B} \rightarrow \mathrm{C}$$

$$w = k \cdot C_{\mathrm{A}}^{\mathrm{n_1}} \cdot C_{\mathrm{B}}^{\mathrm{n_2}}$$

k	жылдамдық константасы
C_A, C_B	әрекеттесуші заттардың концентрациялары
n_1, n_2	заттар бойынша реакция ретері

Жылдамдық константасы: мәні мен бірліктері

Физикалық мәні

$$C_A = C_B = 1 \text{ моль/л} \Rightarrow w = k$$

бірлік концентрациялардағы жылдамдық

Тәуелді

- заттардың табиғаты
- температура
- катализатор
- еріткіш

Тәуелсіз

реагенттердің концентрациясына

Реакция реті, n	k бірлігі
0	моль · л$^{-1}$ · с$^{-1}$
1	с$^{-1}$
2	л · моль$^{-1}$ · с$^{-1}$
3	л^2 · моль$^{-2}$ · с$^{-1}$

Жалпы өрнек

$$[k] = (\text{моль/л})^{1-n} \cdot \text{с}^{-1}$$

Реакция реті: жеке және жалпы рет

Жеке (зат бойынша) рет: n_A, n_B

Жалпы рет: $n = n_A + n_B$

Реакция	Кинетикалық теңдеу	Рет, n
$H_2 + I_2 \rightarrow 2HI$	$w = k \cdot C_{H_2} \cdot C_{I_2}$	2 (бүтін)
$2NO + O_2 \rightarrow 2NO_2$	$w = k \cdot C^2_{NO} \cdot C_{O_2}$	3 (бүтін)
$H_2 + Br_2 \rightarrow 2HBr$ (бастапқы кезең)	$w = k \cdot C_{H_2} \cdot C^{1/2}_{Br_2}$	1,5 (бөлшек)
$2O_3 \rightarrow 3O_2$	$w = k \cdot C^2_{O_3} \cdot C^{-1}_{O_2}$	O_2 бойынша –1 (теріс)
$2NH_3 \rightarrow N_2 + 3H_2$ (W бетінде)	$w = k$	0 (нөлдік)

Реакция реті мен молекулалықтың айырмасы

Критерий	Реакция реті	Молекулалық
Мәндері	кез келген: оң, теріс, нөл, бөлшек	тек бүтін оң сандар: 1, 2, 3
Табиғаты	формальды шама	физикалық мәні бар
Неге қатысты	тұтас реакцияға	бір элементар сатыға
Анықталуы	тәжірибеден	теориялық (механизмнен)
Тәуелділігі	механизмге, реагенттер табиғатына, сыртқы жағдайларға	сыртқы жағдайларға тәуелсіз

Рет пен молекулалық тек элементар реакцияларда сәйкес келеді.

Талдау мысалы: N_2O_5 ыдырауы

$$2N_2O_5 \rightarrow 4NO_2 + O_2$$

1 Болжам

Коэффициент 2 → «екінші ретті» деп ойлау

$$w = k \cdot C^2 \ ?$$

✗ қате

2 Тәжірибе

Өлшенген кинетикалық теңдеу

$$w = k \cdot C_{N_2O_5}$$

n = 1

3 Механизм

Шекті саты – мономолекулалы ыдырау

$$N_2O_5 \rightarrow NO_2 + NO_3$$

молекулалық = 1

Қорытынды: реакция ретін стехиометриялық теңдеуден емес, тек тәжірибеден анықтауға болады.

Қорытынды: негізгі түйіндер

Кинетика – уақыт туралы ғылым

Термодинамика процестің мүмкіндігін, кинетика оның жылдамдығы мен жолын сипаттайды.

Механизм теңдеуден көрінбейді

Күрделі реакция жылдамдығын ең баяу – шекті саты анықтайды.

$w = k \cdot C_A^{nA} \cdot C_B^{nB}$

k – бірлік концентрациялардағы жылдамдық; бірлігі ретке тәуелді.

Рет ≠ молекулалық

Рет – тәжірибелік, кез келген мән; молекулалық – 1, 2, 3, бір сатыға қатысты.

Өзін-өзі тексеруге арналған сұрақтар

1. Химиялық кинетиканың зерттеу нысаны мен міндеттері қандай? Оның тепе-теңдік термодинамикасынан айырмашылығы неде?

2. Элементар және күрделі реакцияларға анықтама беріңіз. Ауыспалы комплекс және шекті саты дегеніміз не?

3. Гомогенді және гетерогенді реакциялардың орташа және лездік жылдамдықтары қалай өрнектеледі? Бірліктері қандай?

4. Массалар әрекеттесу заңын тұжырымдаңыз. k-ның физикалық мәні неде және ол неге тәуелді?

5. Реакция реті мен молекулалығын салыстырыңыз. Неге рет бөлшек немесе теріс бола алады?

6. Реакция жылдамдығына әсер ететін негізгі факторларды атап, әсерін қысқаша сипаттаңыз.

Негізгі әдебиеттер

1. Оспанова Ә.Қ., Сейілханова Г.А. Физикалық химия (химиялық кинетика және электрохимия): оқулық. – Алматы: Қазақ университеті, 2023. – 244 б. – ISBN 978-601-04-6459-9.

2. Шәбікова Г.Х. Физикалық химия: оқулық. – Алматы: ҚР ЖОО Қауымдастығы, 2025. – 475 б.

3. Оспанова Ә.Қ., Шәбікова Г.Х., Сыздықова Л.И. Физикалық химияның теориялары мен мәселелері: оқу құралы. – Алматы: Қазақ университеті, 2021. – 189 б. – ISBN 978-601-04-5546-7.

4. Оспанов Х.Қ., Қамысбаев Д.Х., Абланова Е.Х., Шәбікова Г.Х. Физикалық химия: оқулық. – Алматы, 2014. (Химиялық кинетика және электрохимия тарауы).

5. Atkins P., de Paula J., Keeler J. Atkins' Physical Chemistry. – 12th ed. – Oxford: Oxford University Press, 2023. – 944 p. – ISBN 978-0-19-884781-6.

Электрондық ресурс: ҚазҰУ ғылыми кітапханасы – elibrary.kaznu.kz

Қосымша әдебиеттер

6. Шәбікова Г.Х., Оспанова Ә.Қ., Ашимхан Н.С. Физикалық химия пәні бойынша есептер (химиялық кинетика және электрохимия). – Алматы: Қазақ университеті, 2016.

7. Оспанова Ә.Қ., Сейілханова Г.А. Химиялық кинетика және электрохимия. – Алматы: Қазақ университеті, 2010.

8. Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. – 4-е изд. – М.: Высшая школа, 1984.

9. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия: учебник для вузов. – 7-е изд. – М.: Высшая школа, 2009.

Түсті фонмен – есептер жинағы және кинетикаға арналған қазақ тіліндегі оқу құралы.