ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫНЫҢ БІЛІМ ЖӘНЕ
ҒЫЛЫМ МИНИСТІРЛІГІ
ӘЛ-ФАРАБИ АТЫНДАҒЫ ҚАЗАҚ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ

Реакцияның активтену энергиясын аналитикалық және графикалық есептеу жолдары

Химия және химиялық технология факультеті, Физикалық химия, катализ және мұнайхимия кафедрасының оқытушысы

PhD Савденбекова Б.Е.

Алматы, 2026

Дәрістің мақсаты

Химиялық реакцияның активтену энергиясын анықтаудың аналитикалық және графикалық әдістерін меңгерту, Аррениус теңдеуін пайдаланып әртүрлі температурадағы реакция жылдамдығы константалары арасындағы байланысты есептеу және Аррениус графигі арқылы активтену энергиясын анықтау дағдыларын қалыптастыру.

Бақылау сұрақтары

1. Активтену энергиясын анықтаудың теориялық негіздері. Активтену энергиясының физикалық мәнін, оның реакция жылдамдығына және температураға тәуелділігін қарастыру.
2. Активтену энергиясын аналитикалық әдіспен есептеу. Аррениус теңдеуінің екі температураға арналған түрін пайдаланып, активтену энергиясын математикалық жолмен анықтау.
3. Активтену энергиясын графикалық әдіспен анықтау. Аррениус теңдеуінің логарифмдік түрін, ln k мен (1/T) арасындағы байланысты және графиктің көлбеу коэффициенті арқылы активтену энергиясын есептеуді қарастыру.
4. Активтену энергиясын анықтау әдістерінің фармацевтикалық процестердегі қолданылуы. Дәрілік заттардың ыдырау кинетикасын зерттеуде, тұрақтылығын бағалауда және сақтау мерзімін болжауда аналитикалық және графикалық әдістерді қолдану.

Жоспар

- Аррениус теңдеуінің негізгі және логарифмдік түрлері.
Реакция жылдамдығы константасының температураға тәуелділігі.
Екі температурадағы реакция жылдамдығы константаларын есептеу.
Активтену энергиясын эксперименттік мәліметтер бойынша анықтау.
Аррениус теңдеуінің графикалық түрі және оның координаталары.
Аррениус графигінің көлбеулік коэффициенті арқылы активтену энергиясын есептеу.
Аррениус теңдеуін фармацевтикалық процестерде қолдану.
Есептер шығару және нәтижелерді талдау.



Активтену энергиясы – ескі байланысты әлсіретіп (немесе үзіп),
жаңа байланыстың түзілуі басталатын өтпелі күйге жетуге қажетті минималды энергия.

Активті молекулалар – химиялық реакцияға түсу үшін қажетті энергияға ие, яғни активтену энергиясынан кем емес энергиясы бар және тиімді соқтығысу нәтижесінде өнім түзетін молекулалар.

1. Аррениус теңдеуі

Химиялық реакция жылдамдығы константасының температураға тәуелділігі Аррениус теңдеуімен сипатталады:

$$k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$$

Мұндағы:

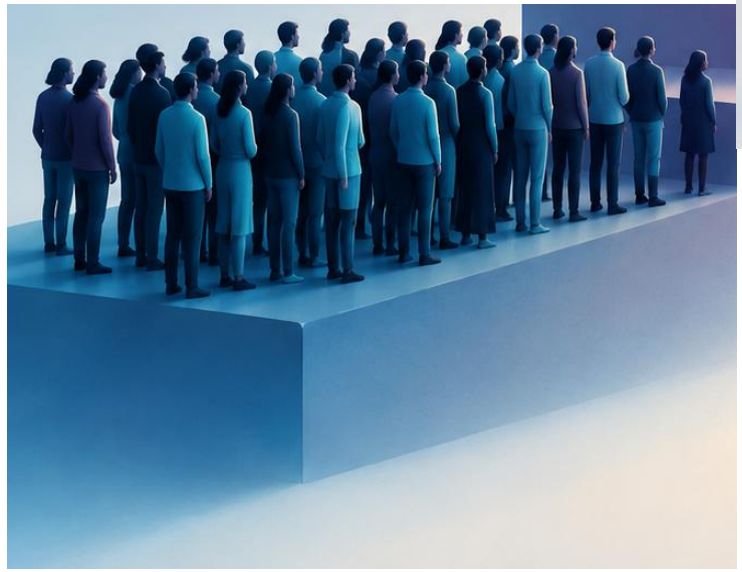
- k – реакция жылдамдығының константасы;
- A – экспоненциалды алдындағы көбейткіш;
- E_a – активтену энергиясы, Дж/моль;
- R – универсал газ тұрақтысы, 8,314 Дж/(моль·К);
- T – абсолют температура, К.

Температура жоғарылаған сайын активтену энергиясынан жоғары энергияға ие молекулалардың үлесі артады. Соның нәтижесінде реакция жылдамдығы константасы көбейеді.

АКТИВТЕНУ ЭНЕРГИЯСЫ ҚАЙДАН ПАЙДА БОЛАДЫ?

Активтену энергиясы химиялық байланысты уақытша әлсірету қажеттілігінен туындайды.
Реакция жүруі үшін молекулалардың иеленуі тиіс минималды энергия деңгейі.

Активтену энергиясы – заттың ішінде сақталып тұрған энергия емес,
ол энергетикалық тосқауылдың биіктігі.







Низкий энергетический барьер

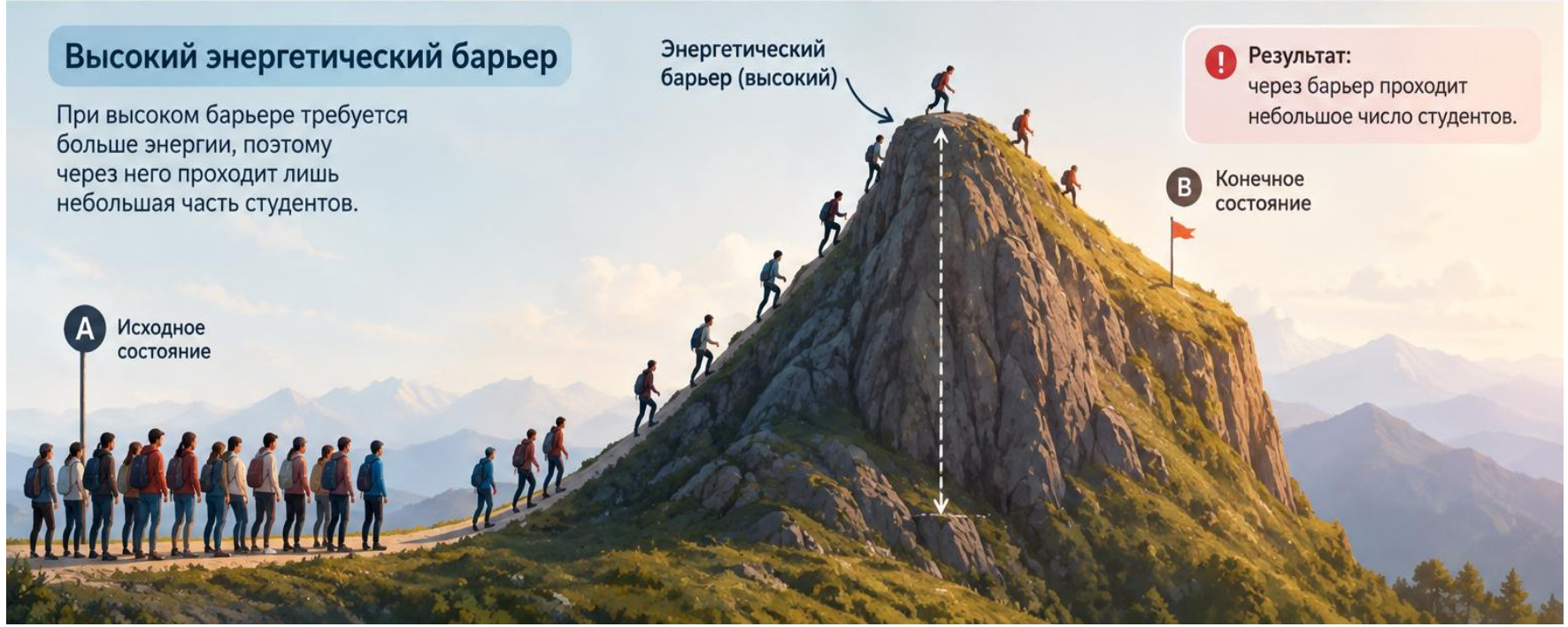
При низком барьере достаточно меньшей энергии, поэтому многие студенты могут его преодолеть.



Результат: через барьер проходит много студентов.

Высокий энергетический барьер

При высоком барьере требуется больше энергии, поэтому через него проходит лишь небольшая часть студентов.



Результат: через барьер проходит небольшое число студентов.

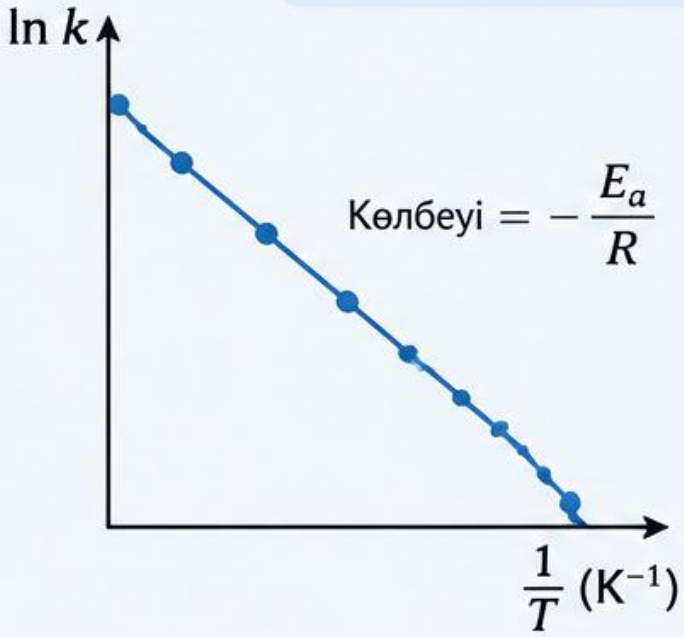
Активтену энергиясын анықтау жолдары

Активтену энергиясы (E_a) – реакцияның жүруі ұшін қажет минималды энергия.
Оны екі негізгі жолмен анықтауға болады: графиктік және есептік.

1. Графиктік жол

Аррениус теңдеуін логарифмдік тұрде жазып,
$\ln(k) - \frac{1}{T}/\frac{1}{T}$ графигі бойынша E_a анықталады.

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT}$$



Графиктің көлбеуін анықтап, E_a есептеледі:

$$E_a = -(\text{көлбеу}) \cdot R$$

мұндағы:

R – газ тұрақтысы (8,314 Дж/(моль·К)

Активтену энергиясын анықтау жолдары

Активтену энергиясы (E_a) – реакцияның жүруі ұшін қажет минималды энергия.
Оны екі негізгі жолмен анықтауға болады: графиктік және есептік.

2. Есептік жол

Температураға тәуелділік берілген кезде, Аррениус теңдеуінен E_a тікелей есептеледі.

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

Екі температурадағы жылдамдық константаларының қатынасын қолданып, E_a анықтауға болады:

$$\ln\frac{k_2}{k_1} = -\frac{E_a}{R}\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$$

мұндағы:

k_1, k_2 – жылдамдық константалары

T_1, T_2 – температуралар (К)

R – газ тұрақтысы (8,314 Дж/(моль·К))

Қорытынды: Активтену энергиясын графиктік жолмен ($\ln k - \frac{1}{T}/\frac{I}{T}$) немесе есептік жолмен $\left(\ln\frac{k_2}{k_1}\right) = -\frac{E_a}{R}\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$ анықтауға болады.



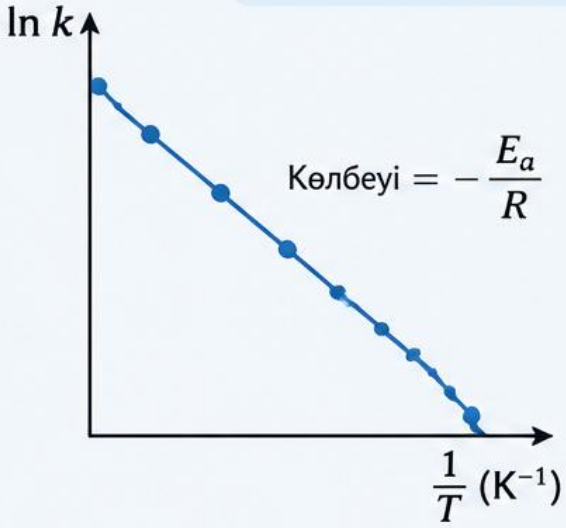
Активтену энергиясын анықтау жолдары

Активтену энергиясы (E_a) – реакцияның жүруі үшін қажет минималды энергия.
Оны екі негізгі жолмен анықтауға болады: графиктік және есептік.

1. Графиктік жол

Аррениус теңдеуін логарифмдік тұрде жазып, $\ln(k) - {}^{1}/_{T}$ графигі бойынша E_a анықталады.

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT}$$



Графиктің көлбеуін анықтап, E_a есептеледі:

$$E_a = -(\text{көлбеу}) \cdot R$$

мұндағы:
R – газ тұрақтысы (8,314 Дж/(моль·К)

2. Есептік жол

Температураға тәуелділік берілген кезде, Аррениус теңдеуінен E_a тікелей есептеледі.

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

Екі температурадағы жылдамдық константаларының қатынасын қолданып, E_a анықтауға болады:

$$\ln \frac{k_2}{k_1} = -\frac{E_a}{R}\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$$

мұндағы:
k_1, k_2 – жылдамдық константалары
T_1, T_2 – температуралар (К)
R – газ тұрақтысы (8,314 Дж/(моль·К))

Қорытынды: Активтену энергиясын графиктік жолмен ($\ln k - {}^{1}/_{T}$) немесе есептік жолмен $\left(\ln \frac{k_2}{k_1}\right) = -\frac{E_a}{R}\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$ анықтауға болады.

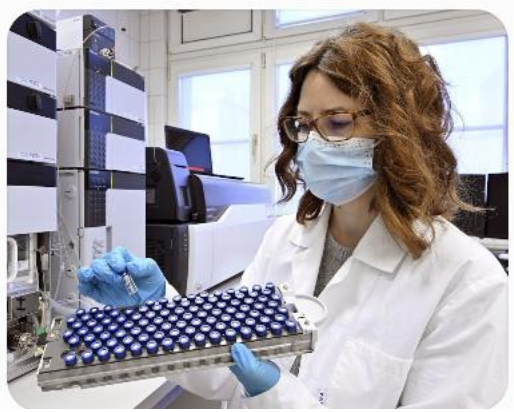
3. Фармацевтикалық химиядағы қолданылуы

Аррениус теңдеуі фармацевтикалық зерттеулерде:

- дәрілік заттардың ыдырау жылдамдығын бағалау;
- температураның химиялық тұрақтылыққа әсерін зерттеу;
- жоғары температурадағы жеделдетілген тұрақтылық сынақтарын талдау;
- активтену энергиясын анықтау;
- сақтау жағдайларын ғылыми негіздеу үшін қолданылады.

Мысалы, дәрілік заттың ыдырау жылдамдығы температура жоғарылаған сайын артса, оның сақтау мерзімі қысқаруы мүмкін. Аррениус теңдеуі осы температуралық тәуелділікті сандық бағалауға мүмкіндік береді.







Теріс активтену энергиясы – температура жоғарылаған кезде реакция жылдамдығының төмендеуімен сипатталатын кинетикалық құбылыс, яғни реакция жылдамдығы константасының температураға тәуелділігінен есептелетін эффективті активтену энергиясының теріс мәнге ие болуы.

Неліктен пайда болады?

- Күрделі реакциялардың көпсатылы механизмі кезінде;
- Реакция алдында аралық тұрақсыз кешендер немесе адсорбцияланған бөлшектер түзілгенде;
- Алдын ала тепе-теңдік сатысының температураға тәуелділігі жалпы реакция жылдамдығына әсер еткенде.

Аррениус теңдеуі бойынша:

$$E_a = -R\frac{d\ln k}{d(1/T)}$$

Маңызды: теріс активтену энергиясы реакцияның энергетикалық тосқауылы мүлдем жоқ немесе энергия бөлінуі теріс дегенді білдірмейді. Ол көбінесе күрделі реакция механизмінің нәтижесінде байқалатын эффективті кинетикалық параметр болып табылады.

Пайдаланған әдебиеттер тізімі

1. Физикалық химия (химиялық кинетика және электрохимия): оқулық / Ә.Қ. Оспанова, Г.А. Сейілханова; Әл-Фараби атын. ҚазҰУ. - Алматы : Қазақ ун-ті, 2023. - 243, [1] б. - ISBN 978-601 04-6459-9 :
2. Оспанова, Әлия Қапанқызы. Физикалық химияның теориялары мен мәселелері : оқу құралы / Ә. Қ. Оспанова, Г. Х. Шәбікова, Л. И. Сыздықова ; Әл-Фараби атын. ҚазҰУ. - Алматы : Қазақ ун-ті, 2021. - 188, [1] б. - ISBN 978-601-04-5546-7 :
3. Физикалық химия пәні бойынша есептер. (Химиялық кинетика және электрохимия) : оқулық / Г. Х. Шабікова, Ә. Қ. Оспанова, Н. С. Ашимхан ; ҚР Білім және ғылым м-гі, Әл-Фараби атын. ҚазҰУ. - Алматы : Қазақ ун-ті, 2016. - 285
4. Физикалық химия : оқулық / С.Х. Хұсайын ; ҚР Білім және ғылым м-гі, Қ.И. Сәтбаев атын. ҚазҰТУ. - Алматы : ҚазҰТУ, 2014. - 403, [1] б. : сур. - Библиогр.: 355-356 б. - ISBN 978-601-228 643-4