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

Температураның фармацевтикалық процестердің кинетикасы мен тұрақтылығына әсері: Аррениус теңдеуі және активтену энергиясы

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

PhD Савденбекова Б.Е.

Алматы, 2026

Дәрістің мақсаты - Температураның фармацевтикалық процестердің жылдамдығына және дәрілік заттардың тұрақтылығына әсерін түсіндіру, Аррениус теңдеуін қолдану арқылы реакция жылдамдығының температураға тәуелділігін сипаттау және активтену энергиясының химиялық реакция кинетикасындағы рөлін анықтау.

Бақылау сұрақтары.

1) Температураның химиялық реакция жылдамдығына әсері. Температура өзгерген кезде молекулалардың кинетикалық энергиясы мен тиімді соқтығысу санының өзгеруін түсіндіру.
2) Аррениус теңдеуі және оның физикалық мәні. Аррениус теңдеуінің математикалық өрнегін, құрамындағы шамаларды және реакция жылдамдығы константасының температураға тәуелділігін қарастыру.
3) Активтену энергиясы және оның реакция кинетикасындағы рөлі. Активтену энергиясы ұғымын, оның реакция жылдамдығына әсерін және активтену энергиясын анықтау әдістерін сипаттау.
4) Температураның фармацевтикалық препараттардың тұрақтылығына әсері. Температураның дәрілік заттардың ыдырау жылдамдығына, сақтау мерзіміне және сақтау шарттарын белгілеуге әсерін қарастыру

Жоспар

- Температураның химиялық реакция жылдамдығына әсері.
- Температуралық коэффициент және Вант-Гофф ережесі.
- Активтену энергиясы және оның физикалық мағынасы.
- Активтену энергиясының реакция жылдамдығына әсері. Энергетикалық диаграмма.
- Аррениус теңдеуі және оның термодинамикалық-кинетикалық негіздері.
- Температураның дәрілік заттардың химиялық тұрақтылығына және сақтау мерзіміне әсері.
- Фармацевтикалық процестерде температураны бақылаудың маңызы.

1. Температураның химиялық реакция жылдамдығына әсері

Температура жоғарылаған сайын молекулалардың орташа кинетикалық энергиясы артады. Нәтижесінде активтену энергиясынан жоғары энергияға ие молекулалардың үлесі көбейіп, тиімді соқтығысулар саны артады. Сондықтан көпшілік химиялық реакциялардың жылдамдығы температура жоғарылаған сайын өседі.

3. Фармацевтикадағы маңызы

Температура дәрілік заттардың гидролиз, тотығу және басқа химиялық ыдырау процестеріне әсер етеді. Мысалы, температураның жоғарылауы кейбір антибиотиктердің, дәрумендердің және белсенді фармацевтикалық ингредиенттердің ыдырауын жылдамдатуы мүмкін.





Фармацевтикалық процестердегі температураның маңызы

1. Дәрілік заттардың тұрақтылығы

Дәрілік заттардың химиялық тұрақтылығы – олардың сақтау және қолдану барысында химиялық құрамын, белсенділігін және сапалық көрсеткіштерін сақтау қабілеті.

Температура жоғарылағанда көптеген дәрілік заттардың ыдырау жылдамдығы артады. Бұл олардың белсенді компоненттерінің концентрациясының төмендеуіне және сақтау мерзімінің қысқаруына әкелуі мүмкін.

2. Дәрілік заттардың ыдырау процестері

- **Гидролиз:** судың қатысуымен химиялық байланыстың үзілуі. Мысалы, ацетилсалицил қышқылының гидролизі.
- **Тотығу:** дәрілік заттардың оттекпен немесе басқа тотықтырғыштармен әрекеттесуі.
- **Фотохимиялық ыдырау:** жарық әсерінен жүретін химиялық өзгерістер.





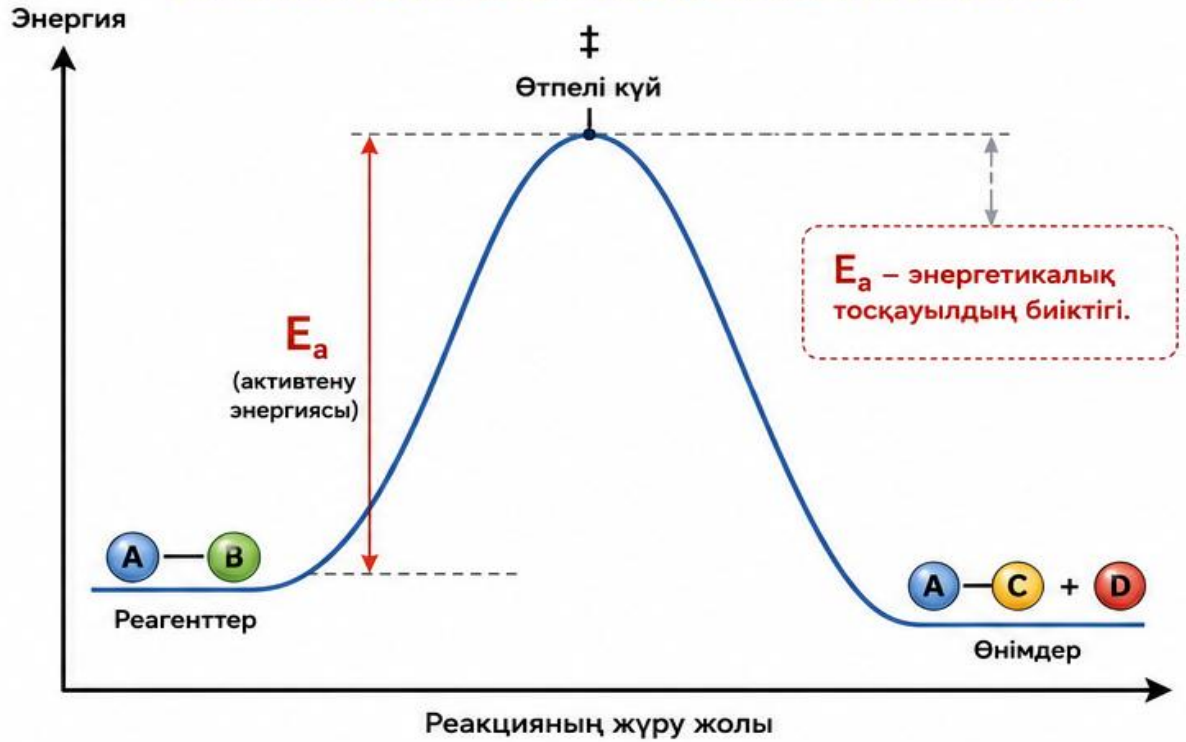


АКТИВТЕНУ ЭНЕРГИЯСЫ ҚАЙДАН ПАЙДА БОЛАДЫ?

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

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

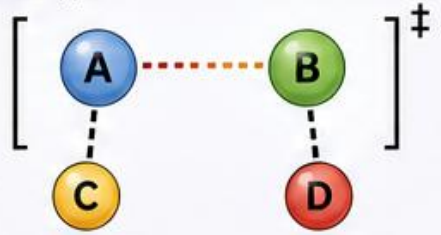
ЭНЕРГИЯ ПРОФИЛІ (РЕАКЦИЯ КООРДИНАТАСЫ ДИАГРАММАСЫ)



НЕ ӨТЕДІ?

Өтпелі күйде:

- Ескі байланыс (A—B) әлсірейді немесе үзіледі.
- Жаңа байланыс (A—C) түзіле бастайды.



Бұл – ең жоғары энергия нүктесі.
Одан кейін жүйе өнімдерге өтеді.

Өнімдер түзіледі



Жаңа байланыстар түзіледі,
энергия бөлінеді.

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

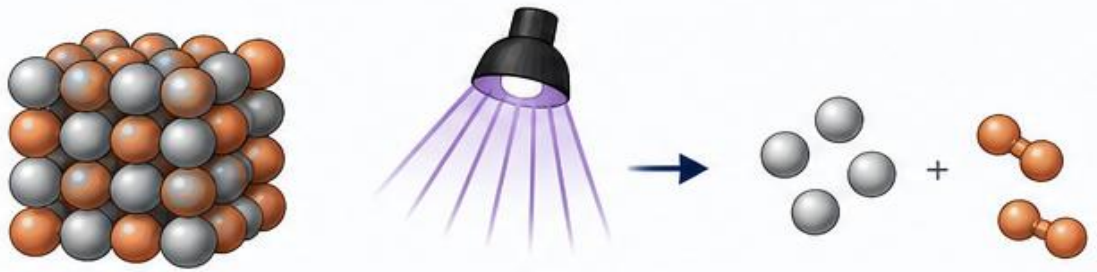
ВАНТ–ГОФФ ЕРЕЖЕСІ ТҮСІНДІРЕ АЛМАЙТЫН РЕАКЦИЯЛАР

Вант–Гофф ережесі: температура әрбір 10 °C-қа артқанда реакция жылдамдығы 2–4 есе артады (γ = 2–4).
Бірақ кейбір реакциялар **температураға осылай тәуелді болмайды**.

2. ФОТОХИМИЯЛЫҚ РЕАКЦИЯЛАР

Мысалы:

$$2AgBr \xrightarrow{h\nu} 2Ag + Br_2$$



Неліктен Вант–Гофф ережесіне бағынбайды?

- Реакцияның жүруі үшін фотон (hν) қажет.
- Жылдамдық негізінен жарықтың интенсивтілігіне тәуелді:

$$v \sim I_{жарық}$$

($I_{жарық}$ – жарық интенсивтілігі)

- Температура реакцияға екінші реттік әсер етеді.
- Сондықтан температураны өзгерту реакция жылдамдығына аз әсер етеді, Вант–Гофф ережесі орындалмайды.

Қорытынды: фотохимиялық реакцияларда анықтаушы фактор – жарық, температура емес. Сондықтан Вант–Гофф ережейді бұл реакциялардың кинетикасын сипаттай алмайды.

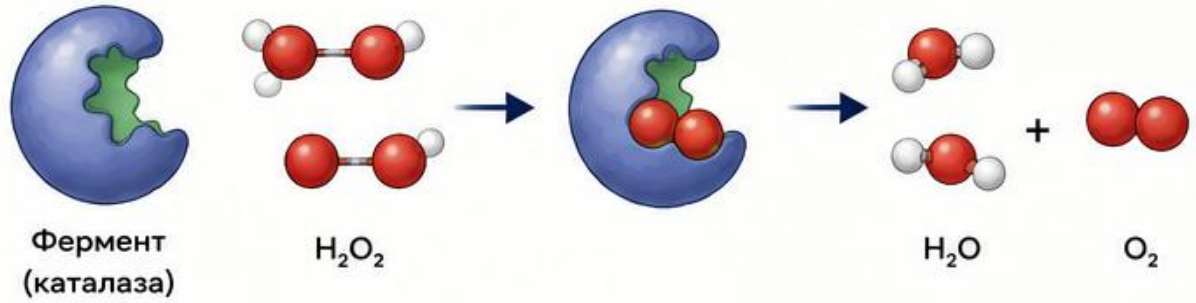
ВАНТ–ГОФФ ЕРЕЖЕСІ ТҮСІНДІРЕ АЛМАЙТЫН РЕАКЦИЯЛАР

Вант–Гофф ережесі: температура әрбір 10 °C-қа артқанда реакция жылдамдығы 2–4 есе артады (γ = 2–4).
Бірақ кейбір реакциялар **температураға осылай тәуелді болмайды**.

1. ФЕРМЕНТТІК (БИОХИМИЯЛЫҚ) РЕАКЦИЯЛАР

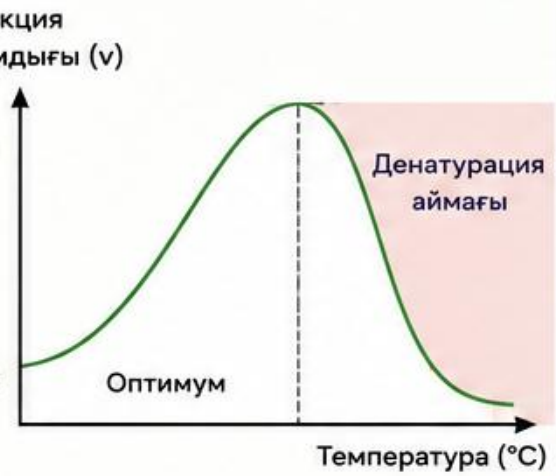
Мысалы:

$$2H_2O_2 \xrightarrow{\text{каталаза}} 2H_2O + O_2\uparrow$$



Неліктен Вант–Гофф ережесіне бағынбайды?

- Температура белгілі бір мәнге дейін артқанда реакция жылдамдығы өседі.
- Белгілі бір температурадан жоғарылағанда ферменттің кеңістіктік құрылысы бұзылады (денатурация).
- Белсенді орталық өзгергендіктен реакцияның жылдамдығы күрт төмендейді.



Қорытынды: фермент денатурацияланғаннан кейін температураны арттыру реакцияны жеделдетпейді, керісінше тежейді. Сондықтан Вант–Гофф ережесі қолданылмайды.

Аррениустың бірінші және екінші жорамалдары



Аррениус өзінің теңдеулерін қорытып шығару үшін бірнеше жорамалдар жасайды:

Бірінші жорамал: химиялық әрекеттесуге барлық молекулалар емес тек активтенген молекулалар түседі, өнім түзілердің алдында активтену процесі жүреді. Активтенген молекулалар соқтығысу нәтижесінде түзіледі, соқтығысу процесі эндотермиялық процесс болатындықтан молекулалар жылу энергиясын (Е) сіңіріп активті күйге көшеді. Мысалы 2А→В реакциясын былай жазуға болады:

$$A+A+E_a \rightarrow A^*+A^* \rightarrow B$$

Активті молекулалардың саны аз болады, олардың энергия бойынша таралуы Больцман теңдеуіне бағынады, бірақ температура өссе активті молекула саны да өседі. Больцман көбейткіші мына формуламен анықталады: $n = n_0 e^{-E_a/RT}$, мұнда n - активтенген бөлшектер, n_0 - бөлшектердің жалпы саны. **Активті молекулалар деп** кинетикалық энергиясы мен ілгерілмелі қозғалыс энергиясының және молекула атомдары мен атомдар тобының айналмалы және тербелмелі қозғалыстары энергиясының артық мөлшері бар молекулаларды айтады. Сондықтан Аррениус E_a - шамасын активтену энергиясы деп атайды.

Екінші жорамал: активті моекуланың түзілуі қайтымды процесс, сондықтан оған массалар әрекеттесу заңы қолданылады, демек активті бөлшектердің концентрациясы термодинамикалық тепе - теңдікте болатындықтан оны тепе - теңдік константасы K_C арқылы өрнектеуге болады:

$$A \Leftrightarrow A^* \text{ және } K_c = \frac{[A^*]}{[A]-[A^*]}.$$

Аррениустың үшінші және төртінші жорамалдары

Үшінші жорамал: активті молекулалардың концентрациясы аз болатындықтан бастапқы молекулалардың бастапқы концентрациясына әсер етпейді, демек $K_c = \frac{[A^*]}{[A]}$ немесе $[A^*] = K_c \cdot [A]$. K_C шамасы үшін Вант - Гоффтың изохора теңдеуін $\frac{d \ln K_c}{dT} = \frac{\Delta U_a}{RT^2}$ деп жазуға болады: мұндағы ΔU_a - активті молекулалар түзілу процесінің жылулығы.

Төртінші жорамал: активті молекулалардың реакция өніміне айналу жылдамдығы температураға тәуелсіз, мұнда температура активті молекулалардың түзілу жылдамдығына ғана әсер етеді.

Осы жорамалдарды қолдана отырып Аррениус өзінің дифференциалды түрдегі теңдеуін қорытып шығырады:

А→В реакциясының жылдамдығы өнімнің концентрациясы бойынша былай жазылады:



Бірақ, $\frac{dB}{dt} = K[A]$ екені белгілі, олай болса $K[A] = const \cdot K_c[A]$, осыдан

$$K = const \cdot K_c \quad (10)$$

Бұл (10) - теңдеуді логарифмдесек: $\ln K = \ln const + \ln K_c$. Температура (Т) бойынша дифференциалдасақ:

$$\frac{d \ln K}{dT} = \frac{d \ln K_c}{dT}$$

Ал $\frac{d \ln K_c}{dT} = \frac{\Delta U}{RT^2} = \frac{E_a}{RT^2}$ болатындықтан,

$$\frac{d \ln K}{dT} = \frac{E_a}{RT^2}$$

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