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

Бірінші, екінші және нөлінші ретті қарапайым қайтымсыз реакциялардын кинетикалық талдау. Жартылай ыдырау периоды.

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

PhD Савденбекова Б.Е.

Алматы, 2026

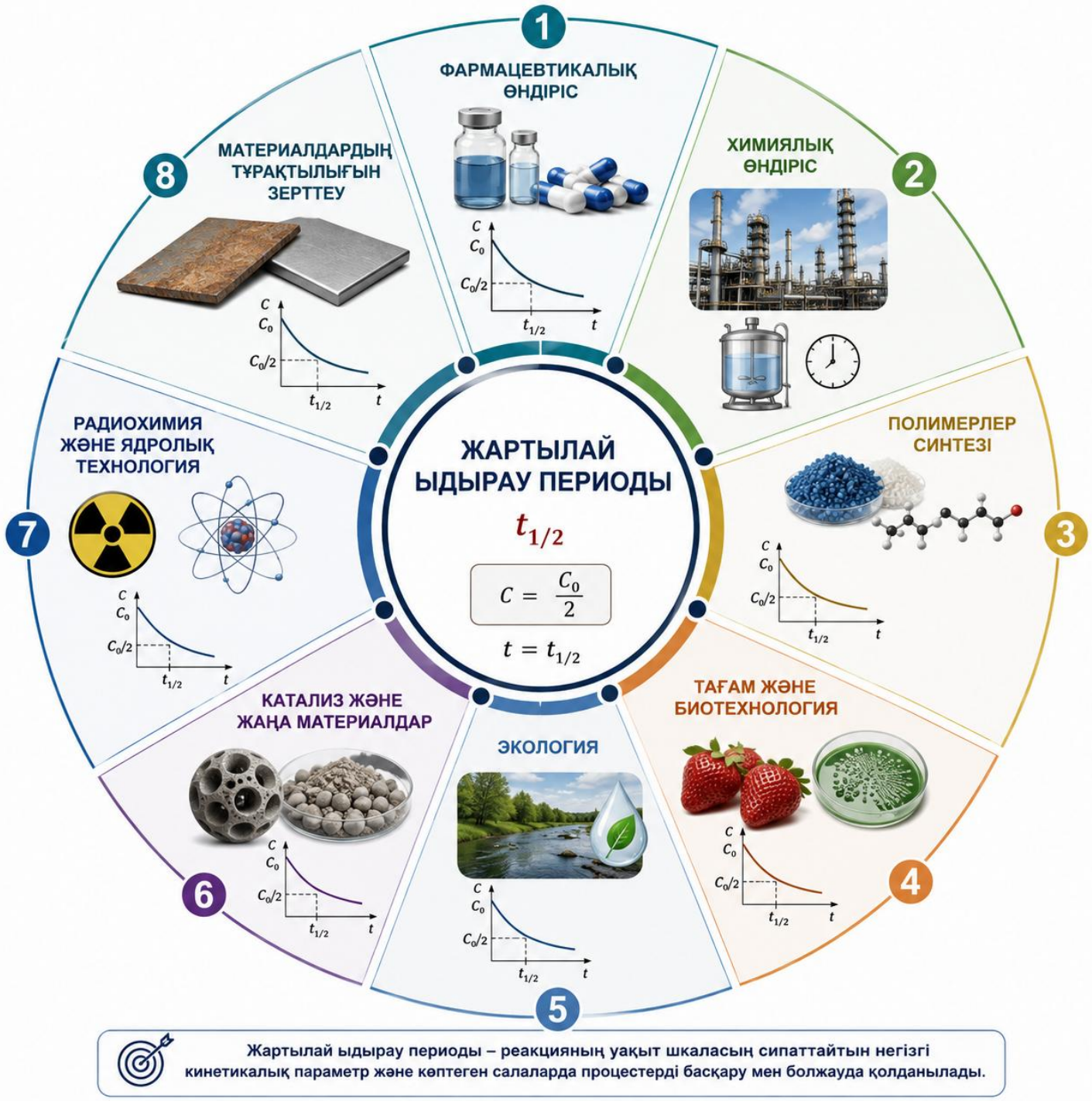
Дәрістің мақсаты: нөлінші, бірінші және екінші ретті қайтымсыз реакциялардың интегралдық кинетикалық теңдеулерін қорыту әдістерімен таныстыру; әр реттілік үшін жылдамдық константасының өлшем бірліктерін табуды және жартылай ыдырау периодының реагенттердің бастапқы концентрациясына тәуелділік ерекшеліктерін графиктік әрі математикалық тұрғыдан талдау.

Бақылау сұрақтары

1. 1. Бірінші ретті реакция жылдамдығы константасының өлшемі «уақыт-1» екенін дәлелдеңдер.
2. Бірінші ретті реакцияның жартылай ыдырау периоды әрекеттесуші заттың концентрациясына тәуелді емес, басқа реттілер үшін концентрация әсер ететінін негіздеңіз және математикалық түрде дәлелдеңіз.
3. Әрекеттесуші заттардың тең және әртүрлі концентрацияларындағы екінші ретті реакцияның жылдамдық константасының кинетикалық теңдеулерін талдаңыз.
4. Нөлдік ретті реакциялардың жылдамдығы концентрацияларға тәуелді емес екенін дәлелдеңіз және мұндай реакциялардың жылдамдық константасын анықтау әдістерін көрсетіңіз.

Жоспар

-Нолінші ретті қайтымсыз реакциялардың интегралдық кинетикалық теңдеуі және концентрацияның уақытқа тәуелділігі.
- Бірінші ретті қайтымсыз реакциялардың интегралдық кинетикалық теңдеуі және концентрацияның уақытқа тәуелділігі.
- Екінші ретті қайтымсыз реакциялардың интегралдық кинетикалық теңдеуі және концентрацияның уақытқа тәуелділігі.
- Әртүрлі ретті реакциялар үшін жылдамдық константаларының өлшем бірліктері және олардың физикалық мағынасы.
- Жартылай ыдырау периоды ұғымы және оны есептеу әдістері.
- Нөлінші, бірінші және екінші ретті реакциялардағы жартылай ыдырау периодының бастапқы концентрацияға тәуелділігі.
- Әртүрлі ретті реакциялардың кинетикалық теңдеулерін графиктік талдау және реакция реттілігін анықтау ерекшеліктері.
- Интегралдық кинетикалық теңдеулер мен жартылай ыдырау периодының химиялық реакцияларды сандық сипаттаудағы практикалық маңызы.



Жартылай ыдырау периоды – реакцияның уақыт шкаласын сипаттайтын негізгі кинетикалық параметр және көптеген салаларда процестерді басқару мен болжауда қолданылады.

Реакция реттілігі – реакцияның кинетикалық сипаттамасы

Реакция реттілігі – реагент концентрациясының өзгеруі реакция жылдамдығына қаншалықты әсер ететінін сипаттайтын **тәжірибелік кинетикалық шама**. Жалпы жылдамдық теңдеуі: $v = k[A]^m[B]^n$, мұнда **k** – жылдамдық константасы, **m** және **n** – A және B бойынша реттілік, **m+n** – жалпы реакция реттілігі.

Реттіліктің негізгі ерекшеліктері

- Реакция теңдеуінен анықталмайды
- Тәжірибе арқылы анықталады
- Реакция механизміне тәуелді
- Бір реакция әртүрлі жағдайда әртүрлі реттілік көрсетуі мүмкін

Элементар және күрделі реакциялар

Элементар реакция: A + B → өнім, $v = k[A][B]$ — коэффициент = дәреже көрсеткіші.

Күрделі реакция: $2H_2 + 2NO \rightarrow N_2 + 2H_2O$, тәжірибе бойынша $v = k[H_2][NO]^2$ — коэффициент ≠ реттілік.

Made with GAMMA

Реакция реттілігінің ғылыми және өндірістік маңызы

Фармацевтика

Дәрілердің сақтау мерзімі мен тұрақтылық зерттеулері

Химиялық технология

Реактор көлемін есептеу, технологиялық процесті жобалау

Полимер химиясы

Инициаторлардың ыдырауы, полимерлену жылдамдығы

Тағам технологиясы

Витаминдердің ыдырауы, сақтау мерзімін болжау

Экология

Ластағыштардың ыдырау жылдамдығы, фотокаталитикалық тазарту

Катализ

Жаңа катализаторлардың тиімділігін бағалау, реакция уақытын қысқарту

Негізгі қорытынды: Реакция реттілігі — тек теориялық ұғым емес, ол өнеркәсіптік процестерді жобалау, дәрі-дәрмек сапасын бақылау және экологиялық қауіпсіздікті қамтамасыз етуде практикалық маңызы зор кинетикалық параметр.

Made with GAMMA

БІР ХИМИЯЛЫҚ РЕАКЦИЯ ӘРТҮРЛІ ЖАҒДАЙДА ӘРТҮРЛІ РЕТТІЛІК КӨРСЕТУІ МҮМКІН

Мысал реакция: $H_2O_2\ (aq)$ **ыдырауы:** $2H_2O_2 \rightarrow 2H_2O + O_2$

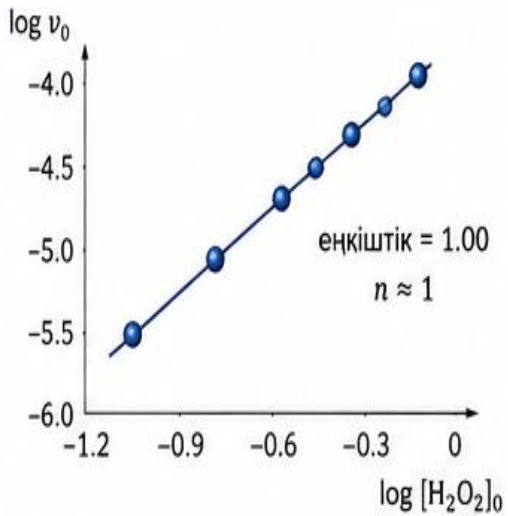
- Реакцияның жалпы жылдамдық теңдеуі: $v = -\frac{d[H_2O_2]}{dt} = k[H_2O_2]^n$ мұндағы n – реттілік

1-ЖАҒДАЙ: СҰЙЫҚ ФАЗА, БӨЛМЕ ТЕМПЕРАТУРАСЫ, КАТАЛИЗАТОР ЖОҚ

Эксперименттік бастапқы деректер

$[H_2O_2]_0$, М	Бастапқы жылдамдық, v_0 (М/с)
0.100	1.02×10^{-5}
0.200	2.05×10^{-5}
0.300	3.07×10^{-5}
0.400	4.11×10^{-5}

Реттілікті анықтау (логарифмдік әдіс)



Қорытынды: Бұл жағдайда реакцияның реттілігі бірінші ретті ($n = 1$).

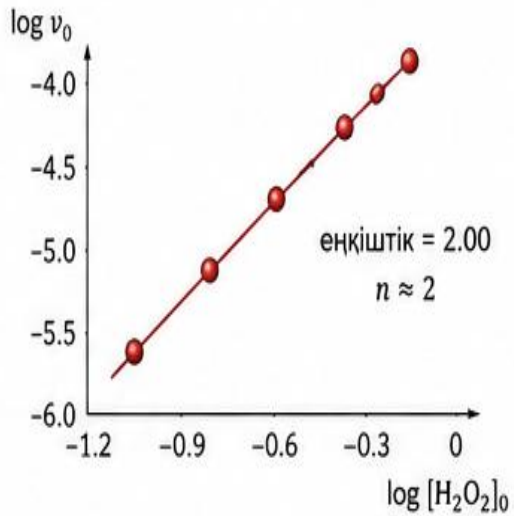
Интегралдық теңдеу: $ln\frac{[H_2O_2]_0}{[H_2O_2]} = kt$

2-ЖАҒДАЙ: СҰЙЫҚ ФАЗА, ЖОҒАРЫ ТЕМПЕРАТУРА, Fe^{3+} КАТАЛИЗАТОРЫ БАР

Эксперименттік бастапқы деректер

$[H_2O_2]_0$, М	Бастапқы жылдамдық, v_0 (М/с)
0.100	5.02×10^{-5}
0.200	2.01×10^{-4}
0.300	4.49×10^{-4}
0.400	8.01×10^{-4}

Реттілікті анықтау (логарифмдік әдіс)



Қорытынды: Бұл жағдайда реакцияның реттілігі екінші ретті ($n = 2$).

Интегралдық теңдеу: $\frac{1}{[H_2O_2]} - \frac{1}{[H_2O_2]_0} = kt$

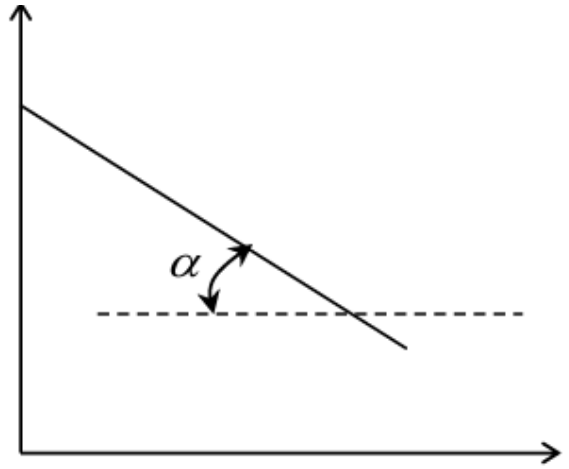
ШАРТТАР ӨЗГЕРГЕНДЕ РЕАКЦИЯ РЕТТІЛІГІ ӨЗГЕРЕТІНІН КӨРСЕТЕТІН БАСҚА МЫСАЛДАР

Реакция	Шарттар	Эксперименттен табылған реттілік (n)	Түсініктеме
$2NO + O_2 \rightarrow 2NO_2$	Төмен қысым (<0.1 атм)	$n \approx 2$ (екінші ретті)	Екі реагент молекулаларының соқтығысуы анықтайды
	Жоғары қысым (>10 атм)	$n \approx 1$ (бірінші ретті)	Алдын ала тепе-теңдік механизмі әсерінен нұсқаушы реттілік төмендейді
$CH_3COOC_2H_5 + OH^- \rightarrow CH_3COO^- + C_2H_5OH$	Сулы орта, $[OH^-]$ өзгермелі	$n \approx 2$ (екінші ретті)	Екі реагент қатысады
	Сулы орта, $[OH^-]$ үлкен артық	$n \approx 1$ (жалған бірінші ретті)	OH^- артық бөлғанда, оның концентрациясы тұрақты деп есептеледі
$H_2O_2 \rightarrow H_2O + 1/2\ O_2$	Катализаторсыз, бөлме t°	$n \approx 1$ (бірінші ретті)	Мономолекулалық механизм басым
	Fe^{3+} катализаторымен, жоғары t°	$n \approx 2$ (екінші ретті)	Катализатор арқылы бимолекулалық жол іске асады

ҚОРЫТЫНДЫ:

Реакция реттілігі реакция механизміне және тәжірибелік шарттарға (температура, қысым, катализатор, еріткіш, концентрациялар) тәуелді.
Сондықтан бір және сол реакция әртүрлі жағдайда әртүрлі реттілік көрсетуі мумкін.

Бір бағытта, қайтымсыз жүретін бірінші реттілікті реакция

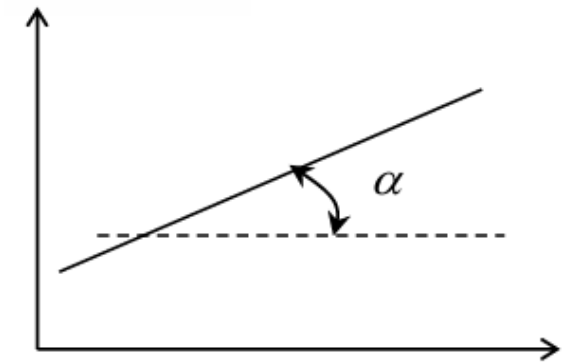


2.1 - сурет. ln(a-x) -тің уақытқа тәуелділігі

$$\ln\frac{c}{c_0} = -Kt \quad \text{немесе} \quad K = \frac{1}{t}\ln\frac{c_0}{c}$$

а $K = \frac{1}{t_{1/2}}\ln\frac{c_0}{c} = \frac{1}{t_{1/2}}\ln 2 = \frac{0{,}693}{t_{1/2}}$ Осыдан $t_{\frac{1}{2}} = \frac{0{,}693}{K}$

Екінші реттілікті қайтымсыз реакция



1/C - тің уақытқа тәуелділігінің қисығы

$$K = \frac{1}{t}\frac{x}{a(a-x)}$$

$$t_{\frac{1}{2}} = \frac{2^{(n-1)}-1}{(n-1)K_n \cdot c_0^{n-1}}$$

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