әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті
Химия және химиялық технология факультеті
Физикалық химия, катализ және мұнайхимия кафедрасы

«Физикалық химияның теориясы және мәселелері »

№15 лекция

Күрделі реакциялар кинетикасын шешудің заманауи тәсілдері, теориялар мен мәселелер

Автор: PhD Савденбекова Б.Е.



Дәрістің мақсаты:
Күрделі химиялық реакциялардың кинетикалық ерекшеліктерін түсіндіру, олардың механизмдерін зерттеудің негізгі теориялары мен заманауи математикалық тәсілдерін қарастыру, реакция жылдамдығына әсер ететін факторларды анықтау және фармацевтикалық процестердегі қолданылуын түсіндіру.

Бақылау сұрақтары

1. Күрделі химиялық реакциялар дегеніміз не және олардың қарапайым реакциялардан айырмашылығы қандай?
2. Күрделі реакциялардың негізгі түрлерін атаңыз.
3. Кезекті және параллель реакциялардың кинетикалық ерекшеліктері қандай?
4. Активті комплекс теориясы күрделі реакциялардың механизмін қалай түсіндіреді?
5. Стационарлық күй әдісінің негізгі қағидасы қандай?
6. Жылдам тепе-теңдік әдісі қандай жағдайда қолданылады?
7. Күрделі реакциялардың кинетикалық моделін құруда дифференциалдық теңдеулердің рөлі қандай?
8. Спектроскопиялық және хроматографиялық әдістер күрделі реакцияларды зерттеуде қалай қолданылады?

Дәрістің толық жоспары

1. **Күрделі реакциялар кинетикасының негізгі ұғымдары**

- Қарапайым және күрделі реакциялардың айырмашылығы.
- Элементар реакциялар және реакция механизмі.
- Аралық бөлшектер, активті кешендер және жылдамдықты анықтайтын саты.

2. **Күрделі реакциялардың негізгі түрлері**

- Қайтымды реакциялар.
- Қатар жүретін реакциялар.
- Тізбекті реакциялар.
- Тармақталған тізбекті реакциялар.
- Каталитикалық және автокаталитикалық реакциялар.
- Тізбекті реакциялар теориясы.

5. **Кинетикалық модельдеудің заманауи тәсілдері**

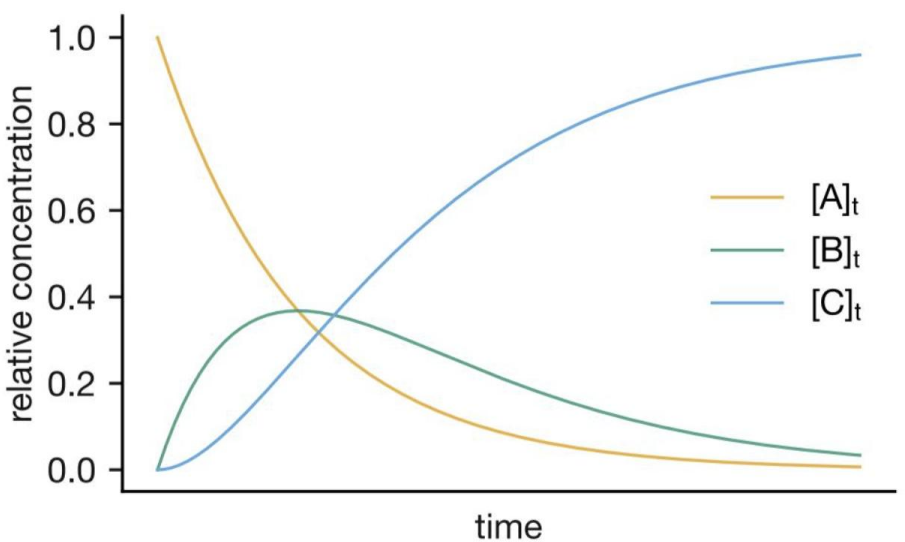
- Кәдімгі дифференциалдық теңдеулер жүйесі (ODE).
- Сандық интегралдау және параметрлерді бағалау.
- Механизмді модельдеу және сезімталдық талдауы.

Күрделі реакциялар кинетикасының жалпы сипаттамасы

Күрделі химиялық реакциялар – жалпы химиялық өзгеріс бірнеше элементар реакция сатысы арқылы жүзеге асатын процестер. Олардың кинетикалық сипаттамалары жеке сатылардың жылдамдығына, өзара байланысына және реакция ортасының жағдайларына тәуелді.

Негізгі ерекшеліктері:

- Бірнеше элементар реакция сатысынан тұрады;
- Аралық өнімдер мен активті бөлшектер түзілуі мүмкін;
- Бір мезгілде бірнеше реакция бағыты жүзеге асады;
- Жалпы реакция жылдамдығы жеке сатылардың жылдамдықтарымен анықталады;
- Кинетикалық теңдеу жалпы реакция теңдеуінің стехиометриялық коэффициенттерінен тікелей анықталмайды.



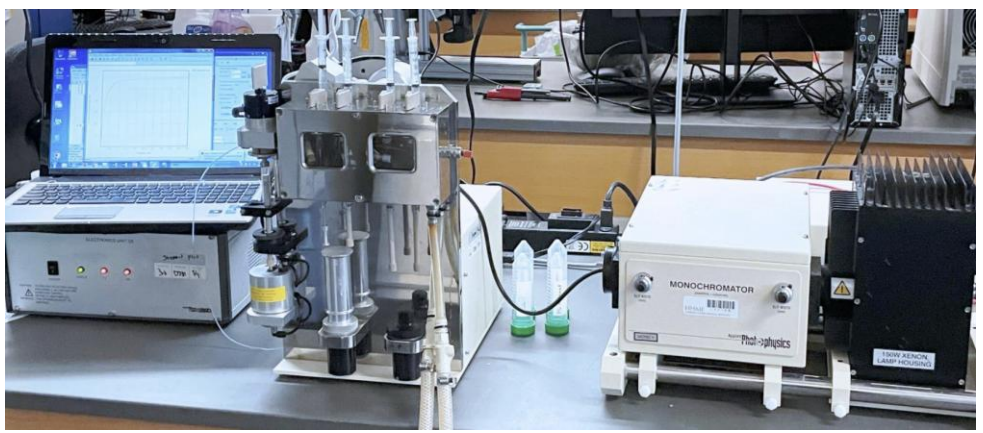
Күрделі реакцияларды зерттеудің заманауи эксперименттік әдістері

Зерттеудің негізгі бағыттары:

- Дәрілік заттың концентрациясын және сандық құрамын анықтау.
- Белсенді фармацевтикалық ингредиенттің химиялық құрылымын сәйкестендіру.
- Қоспалар мен ыдырау өнімдерін анықтау.
- Заттың кристалдық және аморфты күйін зерттеу.
- Дәрілік қалыптың тұрақтылығы мен босап шығу кинетикасын бағалау.

Төрт негізгі әдістің зерттеу нысаны:

Әдіс	Негізгі зерттеу нысаны
UV–Vis	Жарық жұтылуы және зат концентрациясы
HPLC	Қоспа компоненттерін бөлу және сандық анықтау
FTIR	Молекулалық құрылым және функционалдық топтар
XRD	Кристалдық құрылым және фазалық құрам



Күрделі реакцияларды зерттеудің заманауи эксперименттік әдістері



UV–Vis спектрофотометриясы

Жарықты жұту өзгерісі арқылы реакция компоненттерінің концентрациясын уақыт бойынша бақылау.

Жоғары тиімді сұйықтықтық хроматография (HPLC)

Теориялық негізі. HPLC — қоспа құрамындағы заттарды қозғалмалы және қозғалмайтын фазалар арасындағы әртүрлі әрекеттесуіне байланысты бөлу әдісі. Сұйық қозғалмалы фаза жоғары қысыммен хроматографиялық колонка арқылы өткізіледі.

Негізгі хроматографиялық көрсеткіштер:

- Ұсталу уақыты (t_R) — компоненттің детекторға жету уақыты.
- Пик ауданы — зат мөлшерін сандық бағалау үшін қолданылатын сигнал.
- Пик биіктігі — компоненттің детектор жауабының қарқындылығын сипаттайд

Фармацевтикалық қолданылуы:

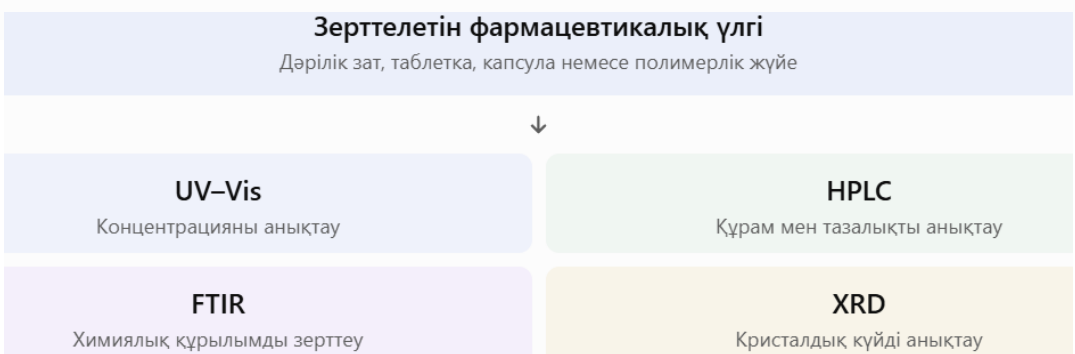
- Дәрілік препараттардың сандық және сапалық талдауы.
- Белсенді ингредиент пен қоспаларды бөлу.
- Ыдырау өнімдерін анықтау.
- Дәрілік заттардың тұрақтылығын зерттеу.
- Фармацевтикалық препараттардың тазалығын бағалау.



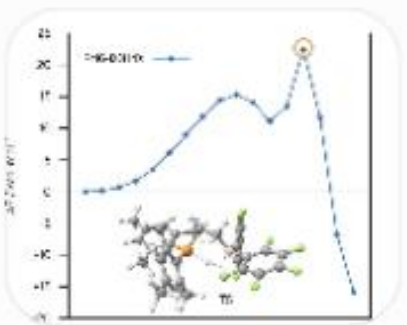
Физика-химиялық әдістерді салыстыру және зерттеу нәтижелерін кешенді бағалау

Негізгі әдістердің салыстырмалы сипаттамасы

Сипаттамасы	UV–Vis	HPLC	FTIR	XRD
Физикалық негізі	Жарық жұту	Хроматографиялық бөлу	ИҚ-сәулені жұту	Рентген дифракциясы
Негізгі ақпарат	Концентрация	Компоненттер құрамы	Химиялық байланыстар	Кристалдық құрылым
Нәтиже түрі	Абсорбциялық спектр	Хроматограмма	ИҚ-спектр	Дифрактограмма
Негізгі қолданылуы	Сандық талдау	Сапалық және сандық талдау	Құрылымды сәйкестендіру	Фазалық талдау

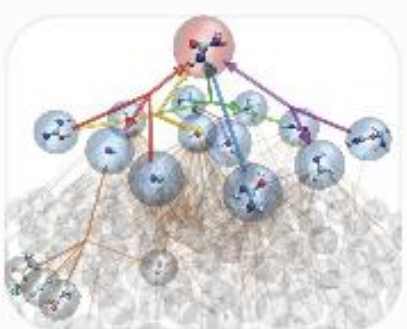


Заманауи есептеу әдістері және машиналық оқыту



Кванттық-химиялық есептеулер

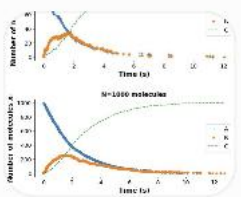
Реакцияның энергетикалық профилін, өтпелі күйлерді және активтену энергияларын есептеу.



Молекулалық динамика

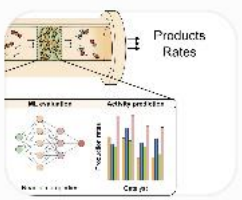
Молекулалардың қозғалысын, соқтығысуын және молекулааралық әрекеттесуін модельдеу.

Заманауи есептеу әдістері және машиналық оқыту



Монте-Карло әдісі

Кездейсоқ оқиғаларға негізделген реакция желілерінің уақыттық эволюциясын модельдеу.



Машиналық оқыту (ML)

Реакция өнімдерін, ықтимал механизмдерді және кинетикалық параметрлерді болжауға көмектесу.

Пайдаланылған дереккөздер тізімі

1. Оспанов Х.Қ., Қамысбаев Д.Х., Абланова Е.Х., Шабикова Г.Х. Физикалық химия. - Өскемен: ШҚМУ баспасы, 1997. - 575 с.
2. Ә. Қ.Оспанова., Г.А. Сейлханова Химиялық кинетика және электрохимия. – Алматы,2006, 2010. 2-ші басылым. – 200 б.
3. Ә.Қ. Оспанова., Г.А. Сейлханова Физикалық химияның таңдаулы тараулары. – Алматы, 2011 ж. – 149 б.
4. Шабикова Г.Х., Оспанова А.К., Ашимхан Н.С. Физикалық химия бойынша есептер мен мысал есептер. – Алматы: КазНУ, 2013. – 272
5. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А., Цирлина Г.А. Электрохимия. – М.: Химия, Колос С, 2006. – 672 с.
6. Васильев В.П. Термодинамические свойства элдектролитов. М. 1984.
7. Г.Х. Шабикова, Л.И. Сыздыкова Современное состояние теории сольватации и растворения. Алматы.2010.
8. **Интернет-ресурстары**