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

«Физикалық химияның теориясы және мәселелері »

№11 лекция

Белсенді соқтығысу теориясының теориялық негіздері. Әртүрлі типті реакциялар үшін жылдамдық және жылдамдық константасы

Автор: PhD Савденбекова Б.Е.



Дәрістің мақсаты:
Белсенді соқтығысу теориясының негізгі қағидаларын түсіндіру, химиялық реакцияның жүруі үшін қажетті энергия мен молекулалардың кеңістіктік бағдарлануының маңызын қарастыру; әртүрлі типті химиялық реакциялар үшін реакция жылдамдығы мен жылдамдық константасының математикалық өрнектерін меңгеру және олардың концентрацияға, температураға, активтену энергиясына тәуелділігін түсіндіру.

Бақылау сұрақтары:

1) Белсенді соқтығысу теориясының негізгі қағидалары қандай?
2) Тиімді және тиімсіз соқтығысулардың айырмашылығы неде?
3) Активтену энергиясының физикалық мәні қандай?
4) Стерикалық фактор реакция жылдамдығына қалай әсер етеді?
5) Соқтығысу жиілігі мен тиімді соқтығысулар санының айырмашылығы неде?

Дәрістің жоспары:

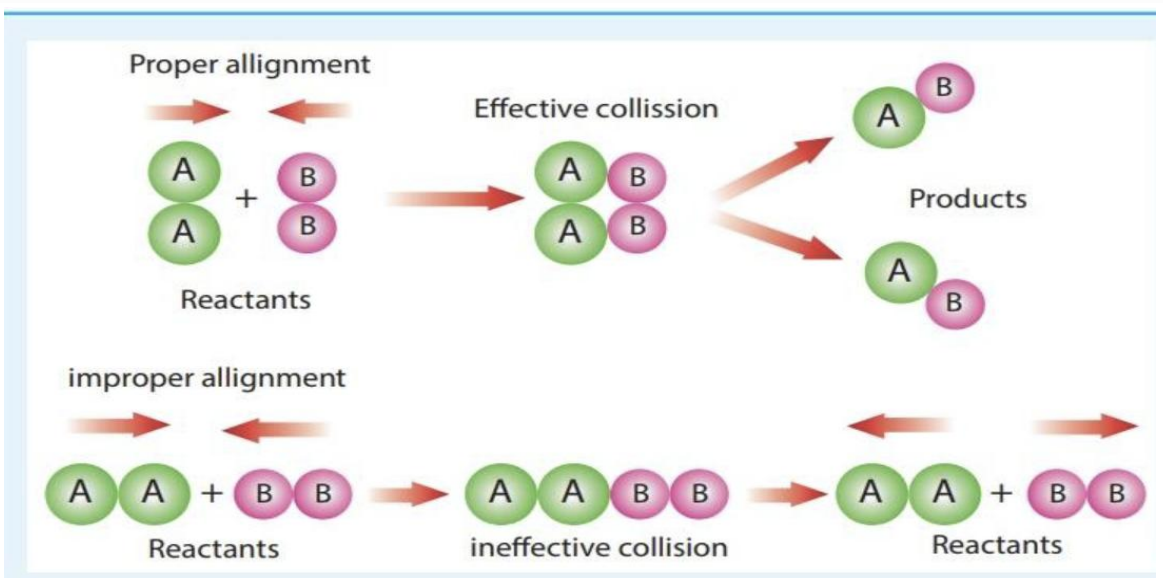
1. Химиялық реакция кинетикасының негізгі ұғымдары.
2. Белсенді соқтығысу теориясының қалыптасуы және негізгі қағидалары.
3. Молекулалардың соқтығысу жиілігі және тиімді соқтығысулар.
4. Соқтығысу энергиясы және активтену энергиясы.
5. Молекулалардың кеңістіктік бағдарлануы және стерикалық фактор.
6. Белсенді соқтығысу теориясы бойынша жылдамдық константасының теңдеуі.
7. Реакция жылдамдығының концентрацияға тәуелділігі және реакция реті.
8. Әртүрлі типті реакциялар үшін жылдамдық теңдеулері.
9. Температура мен активтену энергиясының реакция жылдамдығына әсері.
10. Белсенді соқтығысу теориясының қолданылуы мен шектеулері.

Белсенді соқтығысу теориясының негізгі қағидалары

Белсенді соқтығысу теориясы (Collision Theory) – химиялық реакция молекулалардың соқтығысуы нәтижесінде жүреді және әрбір соқтығысу өнім түзілуіне алып келмейді деп түсіндіретін теория.

Теорияның негізгі қағидалары:

1. Химиялық реакция жүруі үшін реагент молекулалары бір-бірімен соқтығысуы қажет.
2. Барлық соқтығысулар тиімді болмайды.
3. Реакцияға түсу үшін соқтығысқан молекулалардың энергиясы белгілі бір ең төменгі мәннен, яғни активтену энергиясынан, кем болмауы керек.
4. Молекулалар кеңістікте реакция жүруіне мүмкіндік беретін дұрыс бағдарлануы қажет.
5. Тиімді соқтығысулар нәтижесінде химиялық байланыстар үзіліп, жаңа байланыстар түзіліп, реакция өнімдері пайда болады.



Молекулалардың соқтығысу жиілігі және тиімді соқтығысулар

Газ фазасындағы реакцияларда молекулалардың жылулық қозғалысы олардың үздіксіз соқтығысуына себеп болады.

Соқтығысу жиілігі – уақыт бірлігінде бірлік көлемде болатын молекулалар соқтығысуларының саны.

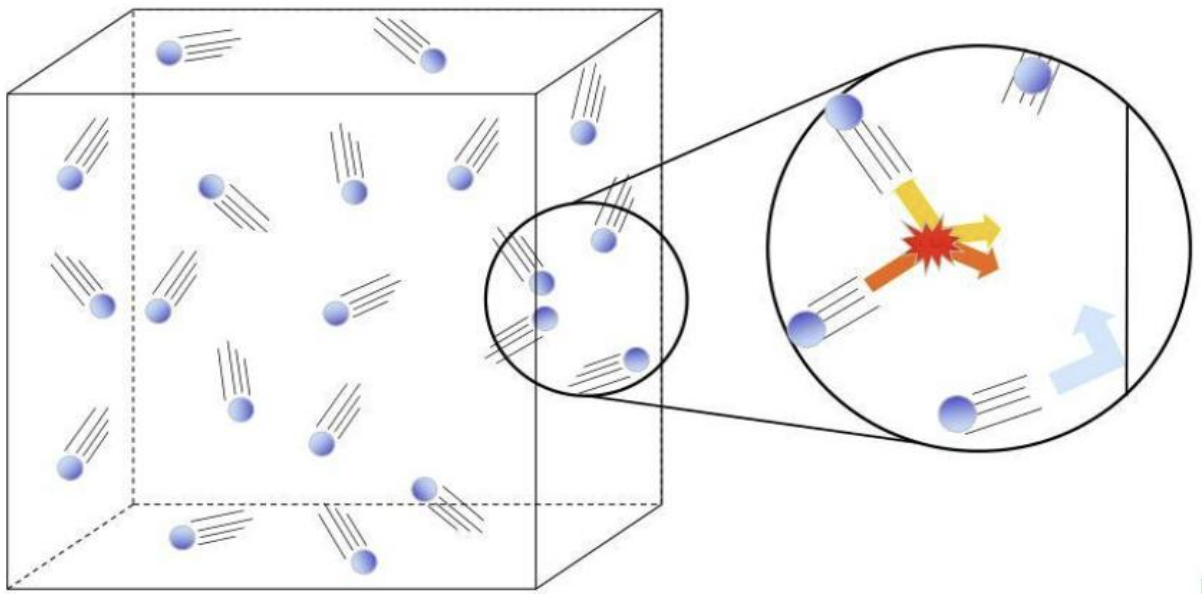
Екі түрлі молекула арасындағы соқтығысу жиілігі үшін кинетикалық теория бойынша:

$$Z_{AB} = n_A n_B \sigma_{AB} \sqrt{\frac{8 k_B T}{\pi \mu_{AB}}}$$

Мұндағы:

- n_A, n_B – молекулалардың сандық концентрациясы;
- $\sigma_{AB} = \pi d_{AB}^2$ – соқтығысу қимасы;
- d_{AB} – тиімді соқтығысу диаметрі;
- k_B – Больцман тұрақтысы;
- T – абсолют температура;
- μ_{AB} – келтірілген масса.

Молекулалардың соқтығысу жиілігі және тиімді соқтығысулар



$$Z_{\text{eff}} = Z_{AB} P e^{-E_a/RT}$$

Мұндағы:

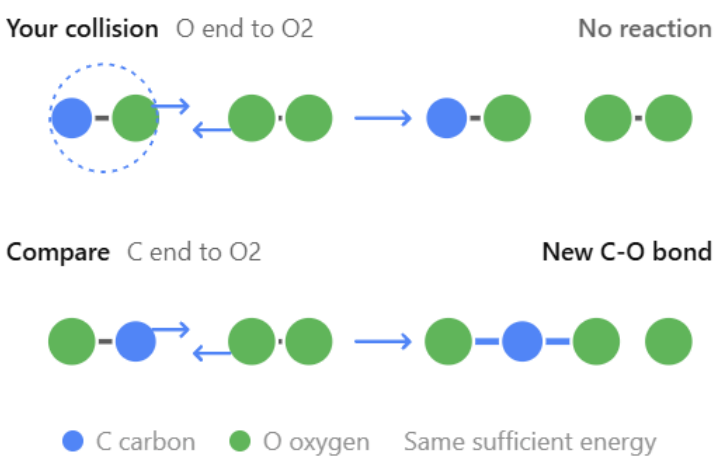
- P – стерикалық фактор;
- E_a – активтену энергиясы;
- R – универсал газ тұрақтысы.

Молекулалардың кеңістіктік бағдарлануы және стерикалық факторжиілігі және тиімді соқтығысулар

Молекулалардың соқтығысу кезінде кеңістікте дұрыс орналасуы – химиялық реакцияның жүзеге асуына әсер ететін маңызды шарттардың бірі.

Стерикалық фактор (P) – молекулалардың соқтығысу кезінде реакция жүруіне қолайлы кеңістіктік бағдарлануының ықтималдығын сипаттайтын коэффициент.

Мысал ретінде CO және O_2 молекулаларының әрекеттесуін қарастыруға болады:



$$2CO + O_2 \rightarrow 2CO_2$$

Стерикалық факторға әсер ететін факторлар:

- Молекулалардың геометриялық құрылысы;
- Реакциялық орталықтардың орналасуы;
- Функционалдық топтардың кеңістіктік қолжетімділігі;
- Стереохимиялық ерекшеліктер;
- Реагенттердің молекулалық өлшемдері.

Белсенді соқтығысу теориясы бойынша жылдамдық константасы

Реакция жылдамдығы реагенттердің концентрациясына тәуелді. Бұл тәуелділік тәжірибе арқылы анықталатын жылдамдық теңдеуімен өрнектеледі.

Жалпы түрде:

$$v = k[A]^m[B]^n$$

Мұндағы:

- k – жылдамдық константасы;
- $[A]$, $[B]$ – реагенттердің концентрациясы;
- m, n – сәйкес реагенттер бойынша реакция реттері;
- $m + n$ – жалпы реакция реті.

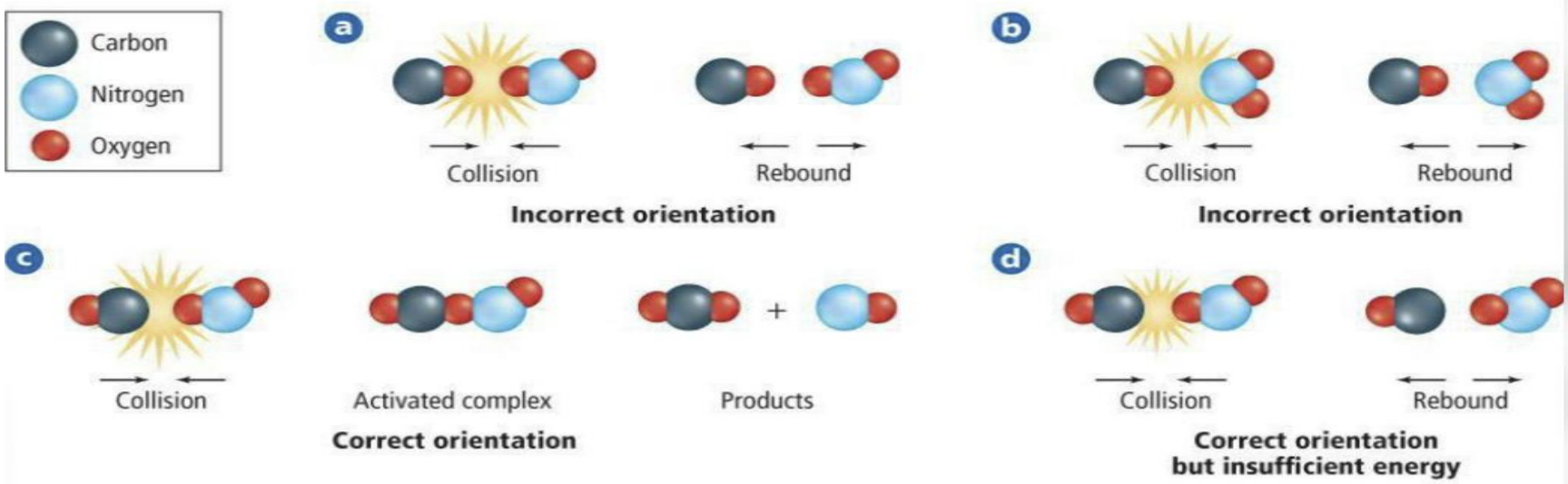
Реакция типі	Реакция теңдеуі	Жылдамдық теңдеуі
Бірмолекулалық	$A \rightarrow P$	$v = k[A]$
Бимолекулалық	$A + B \rightarrow P$	$v = k[A][B]$
Бимолекулалық	$2A \rightarrow P$	$v = k[A]^2$
Үшмолекулалық элементар	$A + B + C \rightarrow P$	$v = k[A][B][C]$

Белсенді соқтығысу теориясының қолданылуы мен шектеулері

Қолданылу бағыттары:

- Газ фазасындағы химиялық реакциялардың жылдамдығын түсіндіру;
- Температураның реакция жылдамдығына әсерін сипаттау;
- Активтену энергиясы мен стерикалық фактордың рөлін бағалау;
- Реакция жылдамдығы константасының физикалық мағынасын түсіндіру;
- Фармацевтикалық заттардың ыдырау кинетикасын зерттеу

$$CO\ (g) + NO_2\ (g) \rightarrow CO_2\ (g) + NO\ (g)$$



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**