

4 ТАҚЫРЫП. ХИМИЯЛЫҚ КИНЕТИКА ЖӘНЕ ТЕПЕ-ТЕҢДІК

Химиялық кинетика химиялық реакциялар жылдамдығы және оларға әртүрлі факторлардың әсерін зерттейді.

Химиялық реакция жылдамдығы әрекеттесуші заттардың біреуінің концентрациясының уақыт бірлігінде өзгеруі.

$$V = \pm \frac{\Delta C}{\Delta t} \quad \text{өлшем бірлігі, моль/мин} \quad (4.1)$$

$$\Delta C = C_2 - C_1$$

$$\Delta t = t_2 - t_1$$

Мұндағы ΔC - концентрацияның өзгеруі

Δt - температураның өзгеруі

Химиялық реакция барысында реакцияға кіретін заттар концентрациясы азайып, реакция өнімдерінің концентрациясы жоғарлайды.

$$V_{\text{гомog.}} = \Delta C / V \cdot \Delta t, \text{ моль/мл·мин} \quad (4.2)$$

$$V_{\text{гетер.}} = \Delta C / S \cdot \Delta t, \text{ моль/см}^2 \cdot \text{мин} \quad (4.3)$$

ӘРЕКЕТТЕСУШІ МАССАЛАР ЗАҢЫ

Химиялық реакция жылдамдығының концентрацияға тәуелділігін **әрекеттесуші массалар заңы** сипаттайды.

Химиялық реакцияның жылдамдығы әрекеттесуші заттар концентрациясының көбейтіндісіне тура пропорционал, ал олардың стехиометриялық коэффициенттері дәреже түрінде алынады.

$aA + bB = cC + dD$ реакциясы үшін

$$V = k[A]^a[B]^b \text{ тура реакция} \quad (4.4)$$

$$V = k[C]^c[D]^d \text{ кері реакция} \quad (4.5)$$

k —жылдамдық константасы, олар әсер етуші заттар табиғатына, температураға тәуелді, бірақ концентрацияға тәуелді емес. Әрекеттесуші массалар заңын 1868 жылы Норвегиялық ғалымдар Гульдберг және Вааге ашқан. Егер $[A] = [B] = 1$, онда $V=K$ жылдамдық константаға тең болады.

Екі теңдеу де бірдей химиялық реакция жылдамдығы теңдеуі, сондықтан **кинетикалық теңдеу** деп аталады.

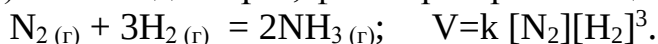
$$V = k[A]^a[B]^b = k[C]^c[D]^d \quad (4.6)$$

мұнда V - химиялық реакция жылдамдығы;

$[A]^a = [B]^b = [C]^c = [D]^d$ -реагенттер және өнімдер концентрациялары;

Нақты мысалдар қарастырайық:

а) гомогендік жүйе, фаза бір агрегаттық күйде болса

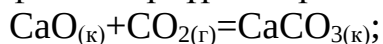


Заттардың агрегаттық күйін белгілеу:

к, к – қатты, кристалл; г – газ тәрізді;

с – сұйық; п – плазмалы.

б) гетерогендік жүйе, фазасы әртүрлі агрегаттық күйде болса:



$$V = K_{CO_2}; \quad \text{немесе} \quad V = K[CO_2]$$

Егер жүйеде қатты зат болса, олардың концентрациялары химиялық реакциялар жылдамдығы тұрақтысына (K) есептеледі де, жылдамдық теңдеуінде жазылмайды, ал сұйық зат және газдардың концентрациясы жазылады да, олардың коэффициенттері дәреже түрінде жазылады.

Химиялық реакция жылдамдығының температураға тәуелділігі

Вант – Гофф ережесі

Бірнеше гомогендік жүйелерде жүйе температурасын (C^0 -пен) әрбір 10^0C көтергенде (түсіргенде) химиялық реакциялар жылдамдығы шамамен 2–4 есе артады (кемиді).

$$V_{t_2} = V_{t_1} \cdot \gamma^{\frac{\Delta t}{10}}; \quad (4.7)$$

мұнда V_{t_2} - соңғы температура кезіндегі реакция жылдамдығы;

V_{t_1} - бастапқы температура кезіндегі реакция жылдамдығы;

γ - гамма, температуралық коэффициент, 2, 3, 4-ке тең.

Химиялық реакция жылдамдығына катализатор әсері

Катализатор – реакция жылдамдығын өзгертіп, бірақ реакция нәтижесінде өздері химиялық өзгермей қалатын заттар.

Катализатор тура және кері реакция жылдамдығына бірдей әсер етеді. Катализатордың қатысы нәтижесінде активті молекулалар саны артады да, жылдамдық өседі. Катализатор реакция жылдамдығын арттырса оң катализ деп, ал төмендетсе теріс катализ деп атайды.

Катализатор әсерінен жылдамдығы өзгертін процестерді каталитикалық процесс немесе **катализ** деп атайды. Реакция жылдамдығын тежейтін катализаторды **ингибитор**, биологиялық катализаторды **ферменттер** деп атайды.

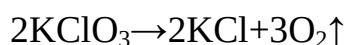
Химиялық тепе-теңдік және оның тұрақтысы

Химиялық реакцияның 2 түрі бар:

1. қайтымды
2. қайтымсыз

Қайтымсыз реакция – тек бір бағытта жүреді және әрекеттесуші заттың біреуі толық шығындалады.

Мысалы:



Қайтымды реакция – кері және тура бағытта жүреді.

Мысалы: $3H_2 + N_2 \leftrightarrow 2NH_3$

Қайтымды реакцияларда ($\leftrightarrow$) тура және кері реакциялардың химиялық реакция жылдамдықтары теңескенде **химиялық тепе-теңдік** туындайды.

$aA + bB = cC + dD$ реакциясы үшін

$V_1 = k[A]^a[B]^b$ тура реакция

$V_2 = k[C]^c[D]^d$ кері реакция

$V_1 = V_2; \quad k[A]^a[B]^b = k[C]^c[D]^d$

$$K_{\text{т.т.}} = \frac{k_1}{k_2} = \frac{[C]^c[D]^d}{[A]^a[B]^b}$$

(4.8)

$aA + bB = cC + dD$ - жалпы теңдеу;

V_1 - тура реакция жылдамдығы;

V_2 - кері реакция жылдамдығы;

k_1, k_2 - тура және кері реакция жылдамдығы тұрақтысы;

$K_{\text{т.т.}}$ - тепе-теңдік тұрақтысы.

Химиялық тепе – теңдік тұрақтысы – берілген реакция үшін тұрақты шама болып табылатын, қайтымды реакцияларда түзілген заттардың молярлық концентрацияларының көбейтіндісін реагент заттардың молярлық концентрацияларының көбейтіндісіне қатынасы, мұнда теңдеудегі коэффициенттер концентрацияның дәрежелік көрсеткіші ретінде есептелінеді.

Ле – Шателье принципі

Химиялық тепе-теңдік кезінде реакциялар тоқтамай, тек қарама-қарсы реакциялардың жылдамдықтары ғана теңесетіндіктен оны жылжымалы, **динамикалық** тепе-теңдік дейміз, жүйенің кез-келген параметрін өзгертсе (P, V, C, T) тепе-теңдік ығысады.

Химиялық тепе-теңдіктің ығысуы Ле – Шателье принципіне бағынады. Химиялық тепе-теңдік күйіне келіп тұрған жүйенің жағдайының біреуін өзгерту (P, V, C, T), тепе-теңдікті сол өзгертуге қарсы әрекет туғызатын реакция бағытына қарай ығыстырады.

Концентрация (C) әсері

$aA + bB = cC + dD$ реакциясы үшін

мұнда a, b, c, d – коэффициенттер;

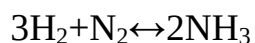
A, B, C, D –реагенттер және өнімдер формулалары

а) A және B реагенттері концентрацияларын арттыру үнемі тепе-теңдікті оңға ығыстырады, ал азайту солға ығыстырады;

б) C және D өнімдерінің концентрацияларын арттыру үнемі тепе-теңдікті солға ығыстырады, ал азайту оңға ығыстырады;

Қысым (P) әсері

Мысалы:



4 моль: 2 моль

а) қысымды (P) ұлғайтқанда жүйе қысылады да, көлем (V) азаяды, көлем бірлігіндегі бөлшектер саны артады, моль саны аз реакция бағытына қарай, реакция жүреді, біздің мысалда - тура реакция;

б) қысымды (P) азайтқанда көлем (V) артады, көлем бірлігіндегі бөлшектер саны азаяды, моль саны көп реакция бағытына қарай, реакция жүреді, біздің мысалда - кері реакция.

Температура әсері (T)

$aA + bB = cC + dD$ $\Delta H < 0$, тура экзотермиялық;

а) Температураны (T) арттырғанда кері реакция бағытына қарай жүреді, яғни эндотермиялыққа ;

б) Температураны (T) азайтқанда тура реакция бағытына қарай жүреді, яғни экзотермиялық.

$aA + bB = cC + dD$ $\Delta H > 0$, тура эндотермиялық;

а) температураны арттыру тепе-теңдікті оңға қарай ығыстырады, яғни эндотермиялық реакция бағытына қарай;

б) температураны азайту тепе-теңдікті солға қарай ығыстырады, яғни экзотермиялық реакция бағытына қарай;