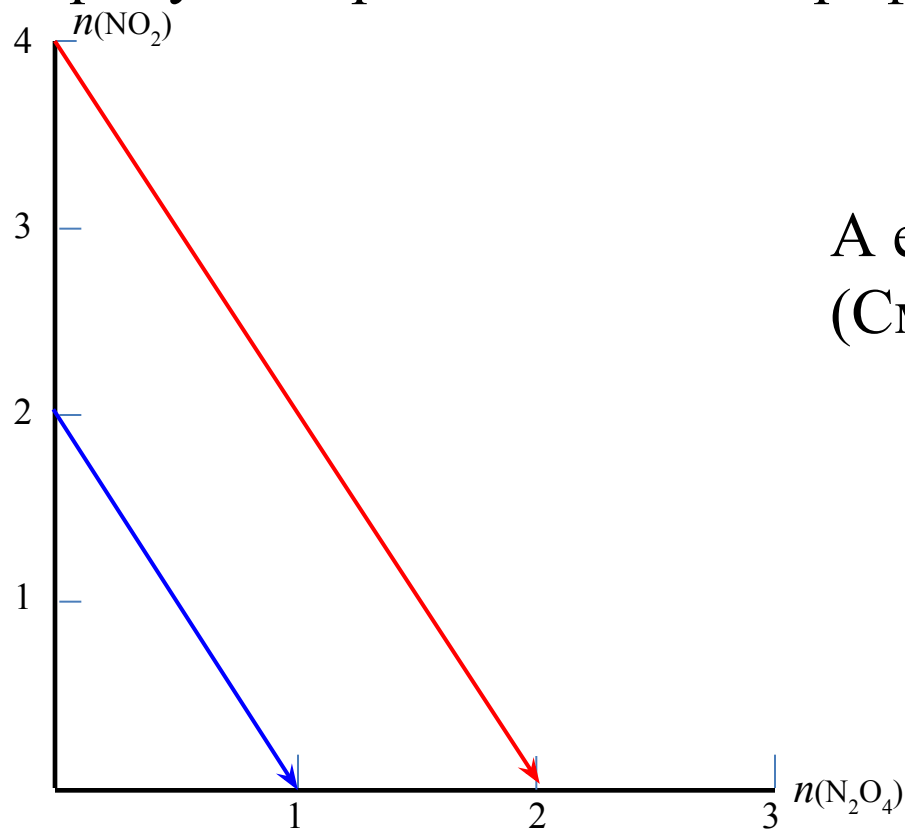


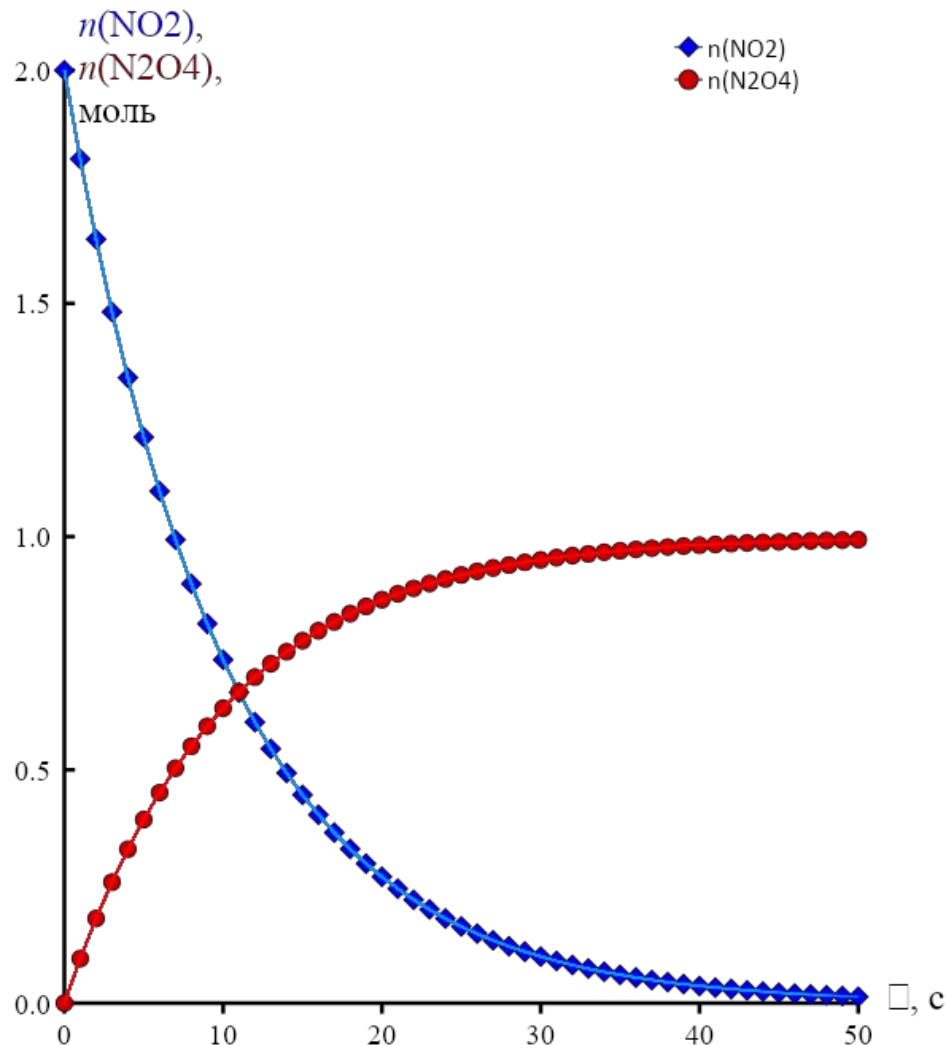
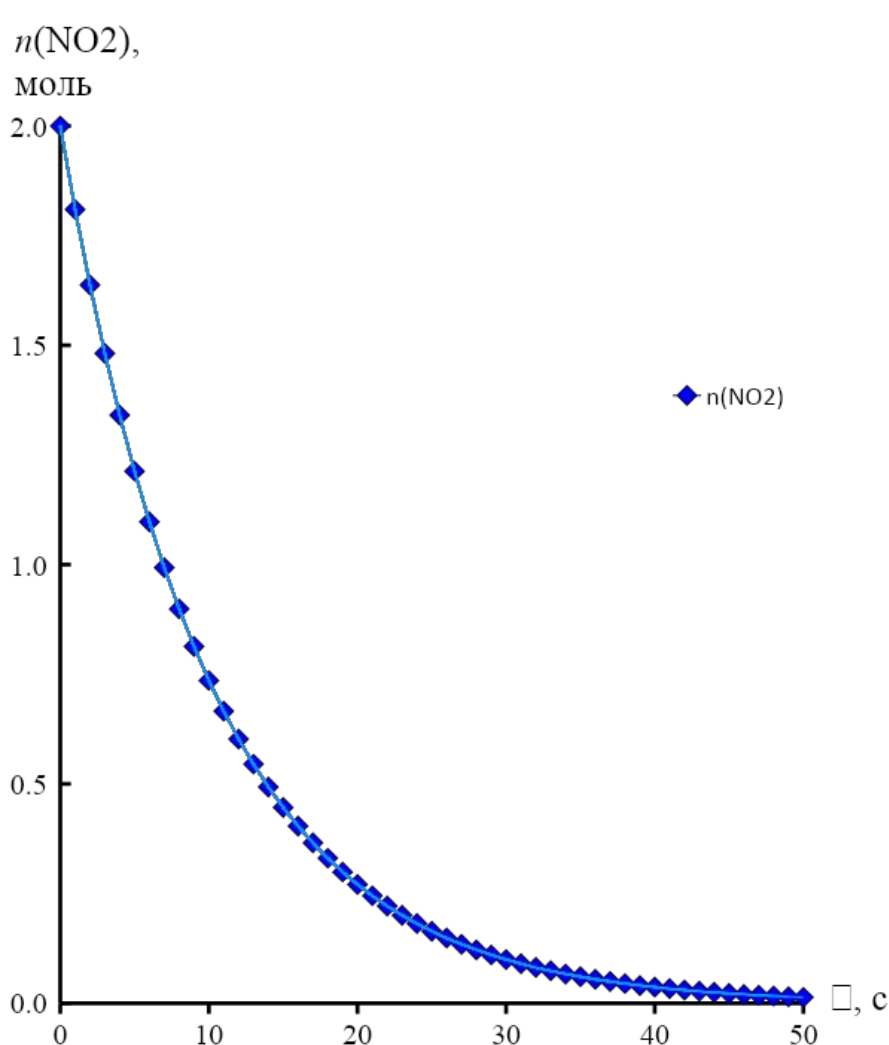
Вернемся к реакциям с участием молекул. Каким способом можно графически показать такое превращение?

Пусть диоксид NO_2 превращается в свой димер: $2\text{NO}_2 \rightarrow \text{N}_2\text{O}_4$. Предположим, взято 2 моль этого оксида. Пусть в нулевой момент времени продукта еще нет. Предположим, что реакция протекает в сторону димера до конца. На графике получим такую зависимость.

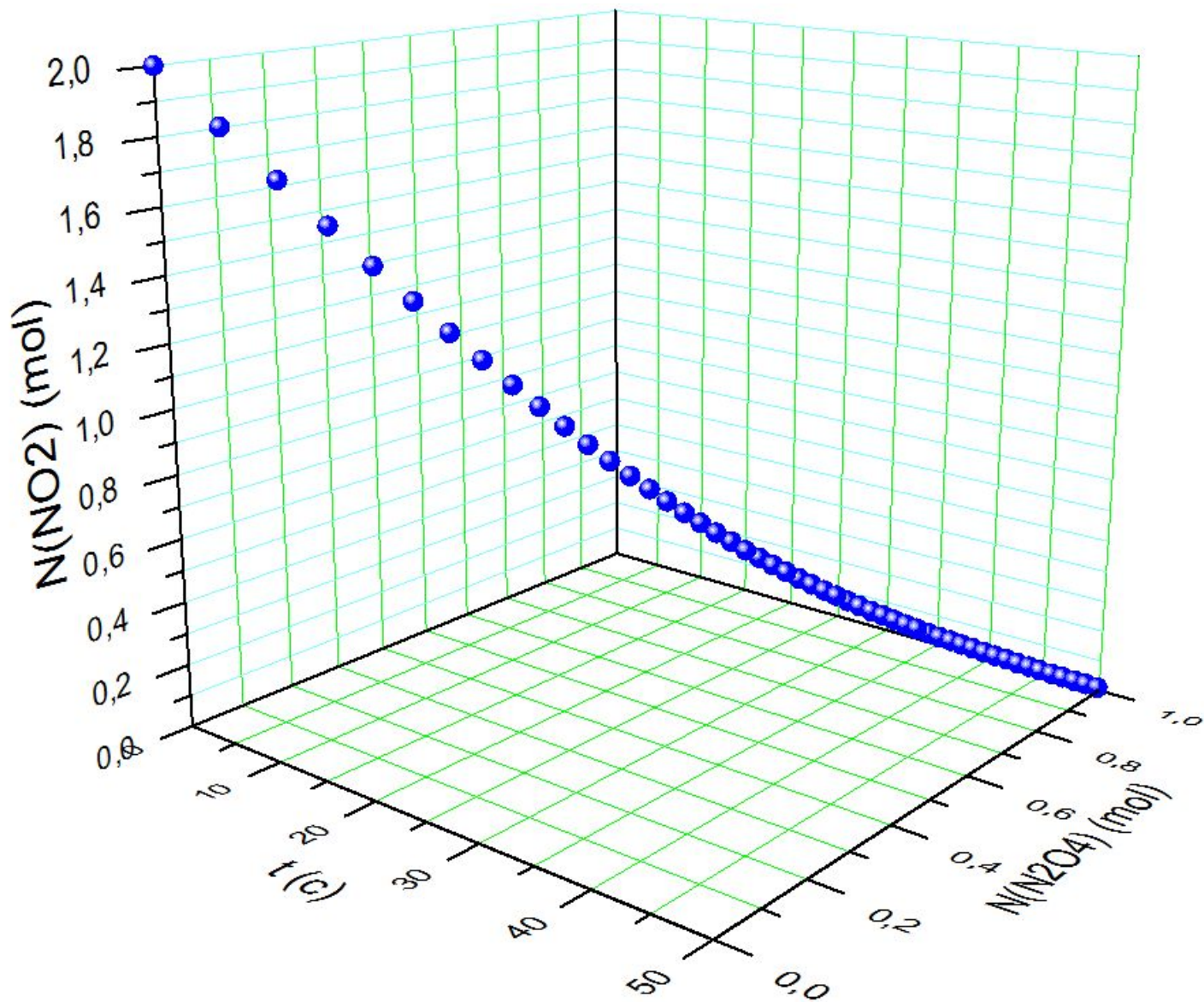


А если взять не 2, а 4 моль NO_2 ?
(См. красную линию.)

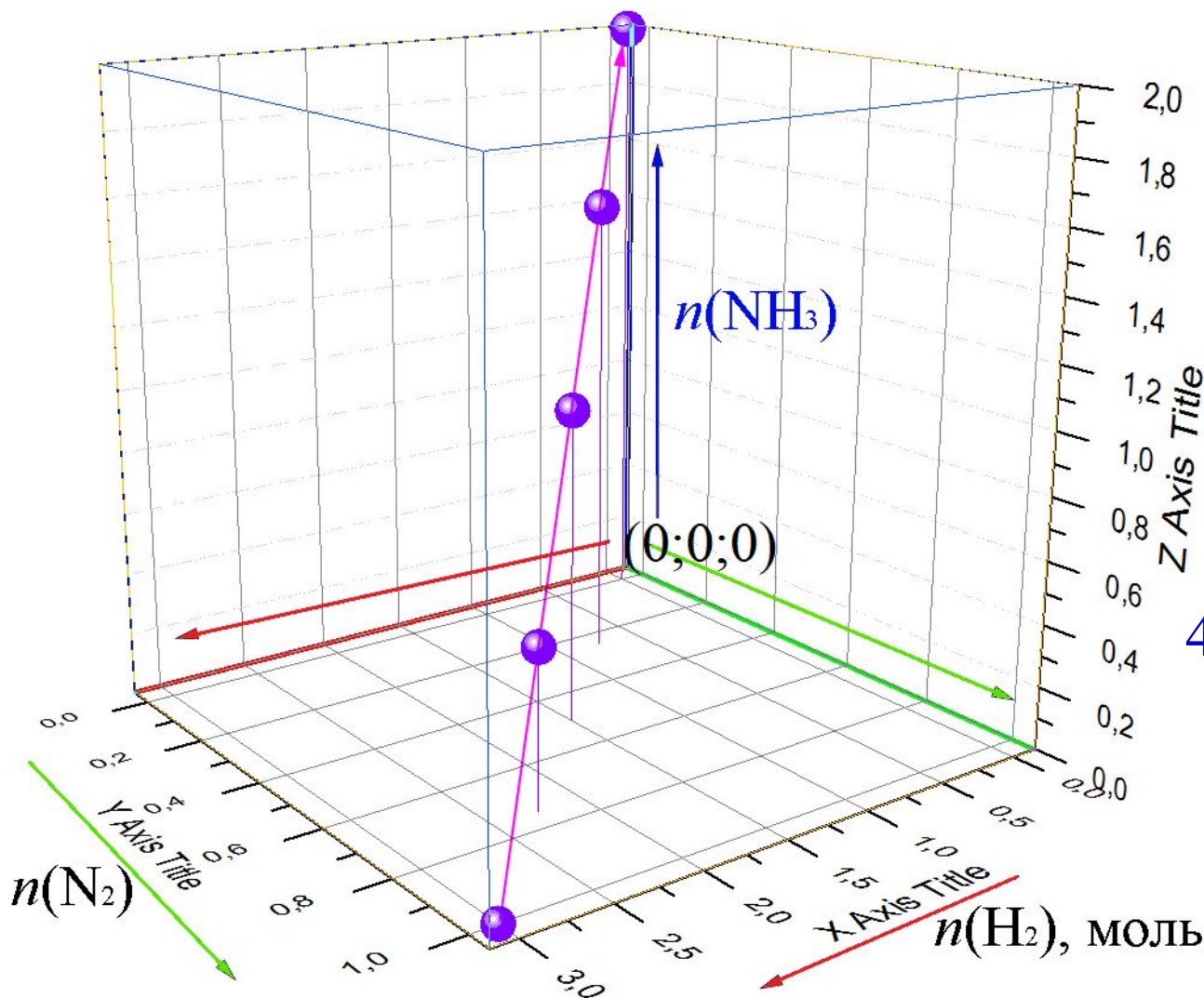
А как отразить превращение $2\text{NO}_2 \rightarrow \text{N}_2\text{O}_4$ во времени, считая его необратимым? На рис. указан *примерный* ход.



А как отразить превращение $2\text{NO}_2 \rightarrow \text{N}_2\text{O}_4$ во времени, считая его необратимым? На рис. представлен 3D-график.



Рассмотрим реакцию $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$, считаем ее для каких-то условий также проходящей до конца. Пусть в начальных условиях имеется 1 моль азота и 3 моль водорода. Как отразить изменение системы при прохождении реакции?



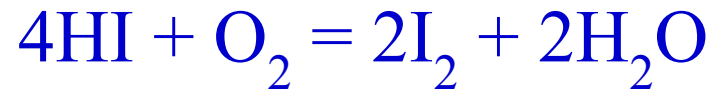
Получается линия в 3D-пространстве. Уже не очень удобно!

А если в реакции участвует не три, а четыре различных сорта молекул?

Например,
 $4\text{HI} + \text{O}_2 = 2\text{I}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$

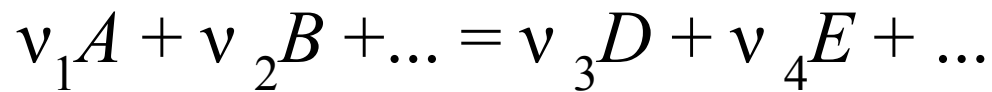
Выход есть. **Полезно** введение химической переменной ξ

Подметим, что для рассматриваемой реакции



отношение количества (т.е, числа моль) прореагировавших или выделившихся веществ к соответствующим стехиометрическим коэффициентам есть величина **постоянная**

Так, для реакции



(она же $\nu_3 D + \nu_4 E + \dots - \nu_1 A - \nu_2 B - \dots = 0$)

$$\xi = (n_i - n_i^\circ) / \nu_j; \quad i = A, B, \dots, j = 1, 2, \dots$$

Для нашего примера

$$\xi = \frac{1}{4} \cdot (n_{\text{HI}}^\circ - n_{\text{HI}}) = (n_{\text{O}_2}^\circ - n_{\text{O}_2}) = \frac{1}{2} \cdot (n_{\text{I}_2} - n_{\text{I}_2}^\circ) = \frac{1}{2} \cdot (n_{\text{H}_2\text{O}} - n_{\text{H}_2\text{O}}^\circ)$$

Учение о химических процессах. Две части:

1. Химическая термодинамика;

2. Химическая кинетика.

Химическая термодинамика – раздел химии о зависимости направления и пределов превращений веществ от условий, в которых эти вещества находятся. Рассматривается лишь начальное и конечное состояние веществ. Не учитывается путь, по которому протекает процесс и развитие во времени. Базовые вопросы т/д-ки: какая теплота выделяется/поглощается; какая работа может быть совершена; каково положение равновесия; каково направление процесса (возможен или невозможен процесс в данном направлении).

Химическая кинетика – раздел химии, в котором изучаются закономерности протекания химических реакций во времени, зависимости этих закономерностей от внешних условий, а также механизмы химических превращений.

Три основные части **химической кинетики**.

1. Феноменологическая кинетика – описание зависимости скорости реакции веществ от концентраций, температуры и других внешних условий. **Прямая задача кинетики**: известны схема (механизм) реакции и величины констант скорости. Требуется найти скорости реакций и концентрации веществ при известных условиях в известное время от начала реакции. **Обратная задача кинетики**: Есть экспериментальные данные. Надо найти механизм и кинетические характеристики (k , E_a , ...).
2. Теоретическая кинетика: вычисление кинетических характеристик (k , E_a , ...) **на основании теории строения вещества и статистической физики**.
3. Макрокинетика – решение кинетических задач в условиях массо- и теплопереноса.

Типичные экспериментальные кинетические данные

Имеется гомогенная реакция $A \rightarrow \nu B$ (типа $N_2O_4 \rightarrow 2NO_2$).
 Проследим, как изменяется концентрация A во времени.

$$v_{\text{средн.}} = -\frac{C_{A_2} - C_{A_1}}{\tau_2 - \tau_1} = -\frac{\Delta C_A}{\Delta \tau}; \quad C_A = \frac{n_A}{V}$$

$$v = -\lim_{\Delta \tau \rightarrow 0} \left(\frac{\Delta C}{\Delta \tau} \right) = -\frac{dC}{d\tau}$$

Это для **гомогенной** реакции и **изохорных** условий!
 Более корректное определение:

$$v = \frac{d\xi}{d\tau}; \quad d\xi = \frac{dC_I}{\nu_i}$$

