

קינטיקה כימית

קביעת סדר ראקציה

- עבור ראקציה כללית: $aA + bB + \dots \longrightarrow pP + qQ + \dots$
- בצורה כללית קצב תגובה יהיה: $\frac{\Delta[A]}{\Delta t} = \frac{\text{השינוי בריכוז}}{\text{זמן השינוי}}$
- חוק הקצב: $-\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{p} \frac{d[P]}{dt} = \frac{1}{q} \frac{d[Q]}{dt} = k[A]^\alpha [B]^\beta$
- סדר ראקציה כולל: $n = \alpha + \beta$
- קביעת הסדר:

1. אם הגרף $\ln[A(t)]$ כפונקציה של t נותן קו ישר הרי שהתגובה היא מסדר ראשון ומשוואת הקו הישר היא: $\ln[A(t)] = \ln[A_0] - kt$.

2. אם הגרף $\frac{1}{[A(t)]}$ כפונקציה של t נותן קו ישר הרי שהתגובה היא מסדר שני ראשון ומשוואת

$$\frac{1}{[A(t)]} = \frac{1}{[A_0]} + kt \quad \text{הקו הישר הוא:}$$

3. שיטת המהירויות ההתחלתיות: $k(t=0) = [A_0]^\alpha [B_0]^\beta \dots$

ראקצייה מסדר ראשון: עבור תגובה כללית:

- חוק הקצב: $-\frac{d[A]}{dt} = \frac{d[P]}{dt} = k_1[A]$ $k_1 = \text{קבוע הקצב או קבוע המהירות.}$
- הצורה האינטגרלית של חוק הקצב: $\ln[A(t)] = \ln[A_0] - kt$ או $[A(t)] = [A(0)]e^{-k_1 t}$
- זמן מחצית חיים: $t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k_1}$ $[A(t_{1/2})] = \frac{1}{2}[A(0)]$

ראקצייה מסדר שני: עבור תגובה כללית:

- חוק הקצב: $-\frac{d[A]}{dt} = \frac{d[P]}{dt} = k_2[A]^2$
- הצורה האינטגרלית: $\frac{1}{[A(t)]} = \frac{1}{[A_0]} + kt$
- זמן מחצית חיים: $t_{1/2} = \frac{1}{k_2[A_0]}$

חוק Arrhenius: תלות קצב התגובה בטמפרטורה

קינטיקה כימית יכולה להיות מתוארת ע"י **מודל ההתנגשויות**, על פיו מולקולות חייבות להתנגש על מנת לעבור ריאקציה. במושגים של המודל הנ"ל ישנו מחסום אנרגטי שיש לעבור על מנת שריאקציה תצא לפועל. מחסום זה נקרא **אנרגיית אקטיבציה, E_a** . קצב הריאקציה וכן השפעת הטמפרטורה על הקצב נקבעים לפי גודל המחסום.

הפרמטרים המשפיעים על קבוע התגובה, k , מתוארים ע"י **משוואת אהרניוס**: $k = Ae^{\frac{-E_A}{RT}}$

כאשר A הוא פקטור המשפיע על תדירות ההתנגשויות ו- $e^{\frac{-E_A}{RT}}$ מציג את פונקציית ההתנגשויות שלהן אנרגיה מספקת ליצירת ריאקציה.

R - קבוע הגזים = 8.31 J/K mole = 1.98 cal/K mole

משיפוע הגרף של $\ln k$ כפונקציה של $1/t$ ניתן לחלץ את E_a .