

WYKŁAD 3

Kinetyka chemiczna a termodynamika

Jeśli proces (np. reakcja chemiczna) zachodzi bez obecności pracy użytecznej ($L_{uż} = 0$) to wg De Dondera zachodzi związek:

$$A \geq 0$$

- gdy $A > 0$ (czyli $\Delta G < 0$) oznacza możliwość zachodzenia samorzutnie (jeśli pozwolą na to opory kinetyczne) reakcji z lewa na prawo (tj. substraty \rightarrow produkty)
- gdy $A = 0$ (czyli $\Delta G = 0$) określa stan równowagi

Termodynamika a Kinetyka chemiczna

W rozważaniach termodynamicznych występuje pojęcie **powinowactwa termodynamicznego** danego procesu (np. reakcji chemicznej).

Powinowactwo chemiczne można wyrazić za pomocą zmiany entalpii swobodnej ($\Delta G_{(T,p)} = L_{\max \text{ uż.}}$), towarzyszącej przejściu danego układu ze stanu początkowego do końcowego.

De Donder wprowadził do termodynamiki – jako miarę powinowactwa chemicznego reakcji chemicznej, zachodzącej przy $T, p = \text{const}$ wielkość:

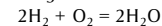
$$A = -\sum \nu_i \mu_i = -\Delta G$$

gdzie:

ν_i - współczynnik stechiometryczny substancji „i”

μ_i – potencjał chemiczny

Przykładowo dla reakcji syntezy wody:



dla wodoru $\nu_{\text{H}} = -2$, dla tlenu $\nu_{\text{O}} = 1$, dla wody $\nu_{\text{H}_2\text{O}} = 2$.



Théophile de Donder
(1872-1957)

Kinetyka chemiczna a termodynamika

Pomiędzy powinowactwem chemicznym procesu a jego szybkością ($T, p = \text{const}$) zachodzi związek:

$$A \nu \geq 0,$$

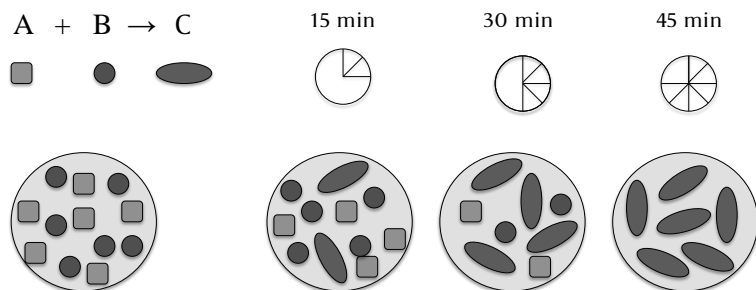
gdzie ν - **szybkość procesu**

Ze wzoru wynika, że A i ν muszą mieć ten sam znak.

Przykładowo:

- jeśli $A > 0$, to $\nu > 0$, to reakcja przebiega „ \rightarrow ”
- jeśli $A < 0$, to $\nu < 0$, to reakcja przebiega w przeciwną stronę „ \leftarrow ”
- jeśli $A \nu = 0$, to układ znajduje się w stanie równowagi termodynamicznej.

Szybkość procesu ?



dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Szybkość procesu ?



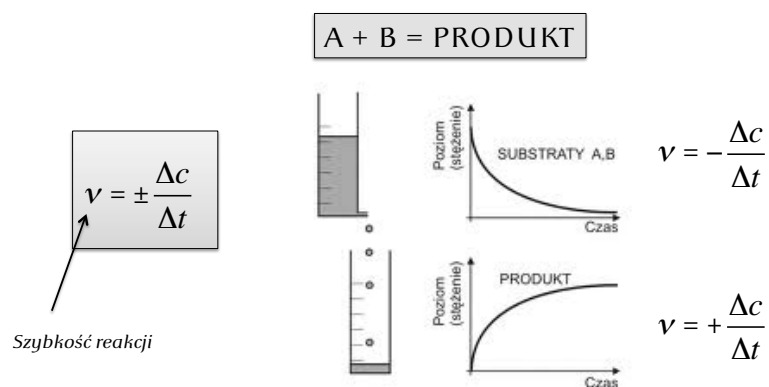
<http://www.geekweek.pl>



<https://pl.wikipedia.org>

dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Model Hydrauliczny Kinetyki Chemicznej



dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Kinetyka chemiczna

SZYBKOŚĆ REAKCJI homogenicznej zachodzącej w stałej objętości:

$$v = \frac{1}{\nu_i} \frac{dc_i}{dt}$$

- v - szybkość reakcji [mol·dm⁻³·s⁻¹], [mol·dm⁻³·min⁻¹], [mol·dm⁻³·h⁻¹],
- c_i - chwilowe stężenie i-tego reagenta [mol·dm⁻³],
- ν_i - współczynnik stechiometryczny i-tego reagenta,
„+” - produkt, „-” - substrat
- t - czas [s⁻¹], [min⁻¹], [h⁻¹],

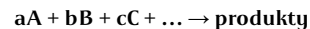
dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Kinetyka reakcji homogenicznych (jednorodnych) zachodzących w obrębie jednej fazy

dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Kinetyka reakcji homogenicznych

W przypadku gdy rozpatrujemy szybkość reakcji v_r tylko w kierunku tworzenia się produktów:



Wówczas prawo działania mas wyraża równanie:

$$v_r = k \cdot c_A^{n_A} \cdot k \cdot c_B^{n_B} \cdot k \cdot c_C^{n_C}$$

gdzie:

c_A, c_B, c_C - stężenia chwilowe substratów,

n_A, n_B, n_C - wyznaczone wykładniki potęgowe przy odpowiednich stężeniach,

k - stała szybkości reakcji zależna od temperatury, a także od obecności i rodzaju katalizatora

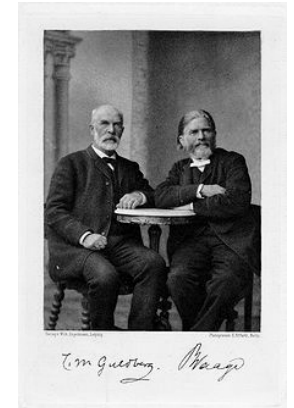
dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Kinetyka reakcji homogenicznych

- Określona jest najczęściej zmianą stężenia któregoś z reagentów w jednostce czasu.
- Zależność szybkości reakcji chemicznej w układzie homogenicznym od stężenia wyraża **kinetyczne prawo działania mas**

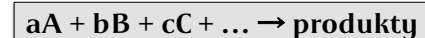
prawo Guldberga - Waage'go (1864):

szybkość reakcji nieodwracalnej w stałej temperaturze, w danym momencie czasu, jest proporcjonalna do chwilowego stężenia (ściślej aktywności) substratów w odpowiednich potęgach



dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Rząd reakcji



Wykładniki potęgowe określają **rząd reakcji względem** danego reagenta A, B, C, czyli

rzędem reakcji nazywamy sumę wykładników potęgowych

$$v_r = k \cdot c_A^{n_A} \cdot k \cdot c_B^{n_B} \cdot k \cdot c_C^{n_C}$$

$$n_A + n_B + n_C + \dots = \text{rząd reakcji}$$

Równanie kinetyczne

Rzędowość reakcji:

Reakcje zerowego rzędu
 Reakcje pierwszego rzędu
 Reakcje drugiego rzędu
 ...

Metody wyznaczania rzędu reakcji:

- podstawiania wartości stężeń reagenta oznaczonych w czasie trwania reakcji do wzoru na stałą szybkości (danego rzędu)

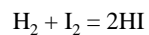
- graficzna

- całkowa Ostwalda i Zawidzkiego

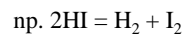
- różnicowa van't Hoffa

dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

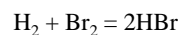
Równanie reakcji a równanie kinetyczne



$$v = k c_A c_B$$



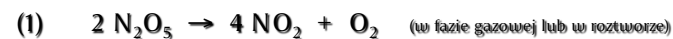
$$v = k c^2$$



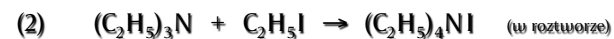
$$v = \frac{k_1 [\text{H}_2] [\text{Br}_2]^{1/2}}{1 + k_2 \frac{[\text{HBr}]}{[\text{Br}_2]}}$$

dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

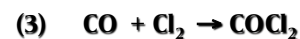
Równanie reakcji a równanie kinetyczne



$$v = -\frac{1}{2} \frac{d[\text{N}_2\text{O}_5]}{dt} = k[\text{N}_2\text{O}_5] \quad n = 1$$



$$v = -\frac{d[\text{C}_2\text{H}_5\text{I}]}{dt} = k[(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{N}] [\text{C}_2\text{H}_5\text{I}] \quad n = 2$$



$$v = \frac{d[\text{COCl}_2]}{dt} = k[\text{CO}] [\text{Cl}_2]^{3/2} \quad n = 5/2$$

dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Kinetyka reakcji zerowego rzędu

Szybkość reakcji nie zmienia się w czasie

$$v = k c^0 = k$$

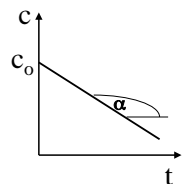
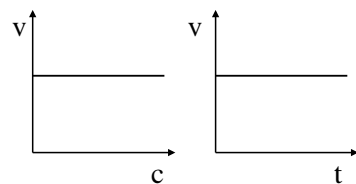
$$-\frac{dc}{dt} = k$$

$$dc = -k dt$$

$$\int_{c_0}^c dc = -\int_0^t k dt$$

$$c - c_0 = -k t$$

$$c = c_0 - k t$$



$$\text{tg } \alpha = a = -k$$

$$k = \frac{c_0 - c}{t}$$

$$t_{0.5} = \frac{c_0}{2k}$$

$$[k] = [\text{mol dm}^{-3} \text{ h}^{-1}], [\text{mol dm}^{-3} \text{ min}^{-1}], [\text{mol dm}^{-3} \text{ s}^{-1}]$$

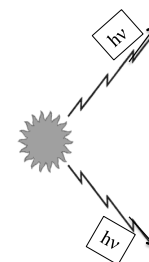
c_0 - początkowe stężenie substratu, $[\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3}]$, $[\text{mg dm}^{-3}]$, $[\text{mg cm}^{-3}]$,

c - stężenie substratu po czasie t , $[\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3}]$, $[\text{mg dm}^{-3}]$, $[\text{mg cm}^{-3}]$,

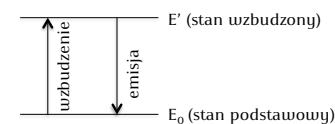
dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Przykłady reakcji zerowego rzędu

np. reakcje fotochemiczne



absorpcja kwantu promieniowania elektromagnetycznego (fotonu) o odpowiedniej energii niezbędnej do przejścia ze stanu kwantowego o niższej energii na stan kwantowy o wyższej lub powstanie wolnych rodników

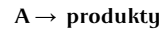


dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Kinetyka reakcji pierwszego rzędu

szybkość reakcji wprost proporcjonalna do jednego członu stężeniowego

Równanie kinetyczne dla reakcji jednocząsteczkowej:

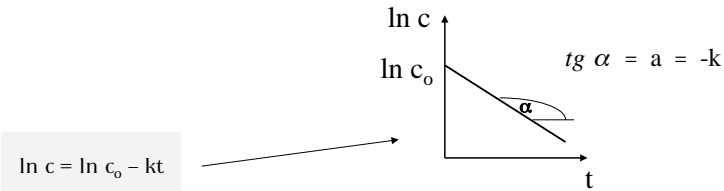


$$v_r = -\frac{dc_A}{dt} = kc_A$$

Chwilowa szybkość reakcji (v_r) jest wyrażona pochodną stężenia substratu względem czasu dc_A/dt .

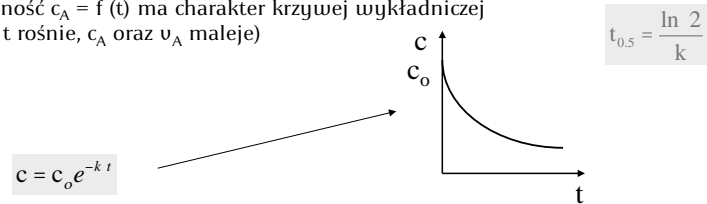
$$n = 1$$

Zależność $\ln c_A = f(t)$ ma charakter liniowy



$$\ln c = \ln c_0 - kt$$

Zależność $c_A = f(t)$ ma charakter krzywej wykładniczej (gdy t rośnie, c_A oraz v_A maleje)



$$c = c_0 e^{-kt}$$

Kinetyka reakcji pierwszego rzędu

Ogólnie szybkość reakcji homogenicznych określona jest pochodną ze stężenia któregoś ze substratów albo któregoś z produktów reakcji.

$$v = \pm \frac{dc}{dt}$$

Znak „+” odnosi się do przypadku, kiedy substancja „i” jest produktem, znak „-”, kiedy substancja „i” jest substratem.

Stężenie substancji reagujących po czasie t wynosi:

$$\ln \frac{a}{c_A} = kt$$

gdzie:

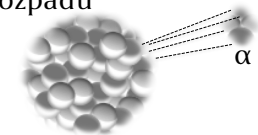
a - stężenie początkowe substancji (tj. dla $t = 0$),

c_A - stężenie chwilowe substancji A po czasie t , przy czym $c_A = a - x$, gdzie x oznacza ubytek stężenia substancji A po czasie t :

$$\ln \frac{a}{a-x} = kt$$

Przykłady reakcji pierwszego rzędu

np. reakcje promieniotwórczego rozpadu



np. reakcje termicznego rozkładu

np. reakcje estryfikacji w rozcieńczonych roztworach

Kinetyka reakcji drugiego rzędu

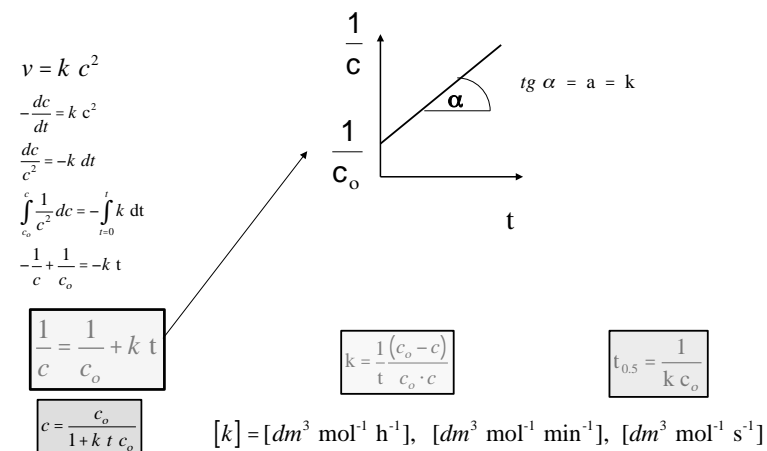
szybkość reakcji wprost proporcjonalna do dwóch członów stężeniowych

$$v = k c_A c_B \quad \text{np. } \text{H}_2 + \text{I}_2 = 2\text{HI}$$

lub

szybkość reakcji wprost proporcjonalna do jednego z członów stężeniowych w kwadracie

$$v = k c^2 \quad \text{np. } 2\text{HI} = \text{H}_2 + \text{I}_2$$



c_0 - początkowe stężenie substratu, $[mol \cdot dm^{-3}], [mg \cdot dm^{-3}], [mg \cdot cm^{-3}]$,

c - stężenie substratu po czasie t , $[mol \cdot dm^{-3}], [mg \cdot dm^{-3}], [mg \cdot cm^{-3}]$,

Okres połowicznej przemiany

- inaczej - połówkowy czas reakcji
- charakteryzuje się kinetyczny charakter procesu, jest tzw. okres połowicznej przemiany ($t_{1/2}$ lub $t_{0.5}$)
- jest to czas konieczny na to, aby przereagowała połowa substratu
- dla reakcji pierwszego rzędu:

$$t_{1/2} = t_{0.5} = (\ln 2) / k$$

czyli:

$$k = (\ln 2) / t_{1/2}$$

W przypadku reakcji pierwszego rzędu okres połowicznej przemiany nie zależy od stężenia początkowego a , natomiast dla reakcji rzędu n , w przypadku ogólnej postaci Równania kinetycznego:

$$v_r = -\frac{dc}{dt} = kc^n$$

okres ten jest odwrotnie proporcjonalny do a^{n-1} :

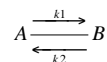
$$t_{1/2} \sim \frac{1}{a^{n-1}}$$

Kinetyka reakcji złożonych

- odwracalne
- równoległe
- następcze

Reakcje odwracalne

Ściśle biorąc wszystkie reakcje są odwracalne (kinetycznie), a w stanie równowagi szybkość reakcji w prawo jest równa szybkości reakcji w lewo. Dla reakcji odwracalnej 1-go rzędu ogólne równanie chemiczne:

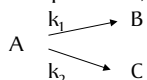


Natomiast równanie kinetyczne w postaci różniczkowej: $\frac{dc_A}{dt} = k_1 c_A - k_2 c_B$

Przykłady: proces estryfikacji, synteza amoniaku.

Reakcje równoległe

Jeśli substraty w danych warunkach mogą reagować na kilka sposobów, tworząc różne rodzaje produktów:



Przykłady: nitrowanie toluenu, nitrowanie fenolu, chlorowanie fenolu.

to zakładając, że reakcja $A \rightarrow B$ i $A \rightarrow C$ są pierwszego rzędu, otrzymamy następujące równanie różniczkowe określające szybkość przemiany chemicznej substancji A w produkty (A i C):

$$-\frac{dc_A}{dt} = k_1 c_A + k_2 c_B$$

dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Kinetyka reakcji heterogenicznych

Przykłady procesów heterogenicznych:

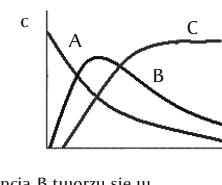
- procesy związane z odgazowywaniem metali,
- procesy rozpuszczania ciał stałych w cieczach,
- procesy wysokotemperaturowej korozji metali w agresywnych gazach,
- krystalizacja cieczy lub kondensacja pary,
- przemiany fazowe zachodzące podczas obróbki termicznej metali i stopów.

dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Reakcje następcze

Rozpatrzmy ogólną reakcję: $A \xrightarrow{k} C$

przebiegającą w stadiach: $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$
 $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$



Założmy: każde stadium stanowi reakcję pierwszego rzędu. Substancja B tworzy się w wyniku rozpadu substancji A i sama się rozpada na substancję C.

Równanie różniczkowe na szybkość:

$$\frac{dc_B}{dt} = k_1 c_A - k_2 c_B$$

W przypadku reakcji złożonej z kilku etapów następczych, znacznie różniących się szybkością, **etap najwolniejszy** będzie określał szybkość wypadkową reakcji złożonej (np. $A \rightarrow B$).

Jeśli np. $k_1 \ll k_2$ stała szybkości k reakcji wypadkowej ($A \rightarrow C$) będzie równa praktycznie k_1 . Oznacza to, że najwolniejszym etapem reakcji wypadkowej będzie etap pierwszy ($A \rightarrow B$); etap ten będzie stanowił **etap kontrolujący szybkość reakcji sumarycznej (wypadkowej)**.

Przykłady: przebiegające w dwóch etapach zmydlenie szczawianu dietylowego wodorotlenkiem sodowym, reakcje łańcuchowe, procesy wchłaniania i eliminacji leków z ustroju.

dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Kinetyka reakcji heterogenicznych

Najbardziej charakterystyczną cechą reakcji heterogenicznych jest ich złożony mechanizm, **obejmujący niekiedy 5 etapów:**

1. proces transportu substratów (przez konwekcję lub dyfuzję) na miejsce reakcji, którą jest z reguły granica faz (ciało stałe - gaz, ciało stałe - ciecz, ciecz - gaz itp.),
2. adsorpcji substratów na granicy faz,
3. właściwa reakcja na granicy faz,
4. desorpcji produktów na granicy faz,
5. proces transportu produktów z miejsca reakcji w głąb graniczących ze sobą faz.

dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Kinetyka reakcji heterogenicznych

Etapem kontrolującym ogólną szybkość procesu jest etap najwolniejszy, stąd wyróżniamy:

- kontrolę kinetyczną procesu (w niskich temperaturach),
- kontrolę dyfuzyjną procesu (wpływ mieszania),
- kontrola mieszana procesu kinetyczno-dyfuzyjna (szybkość dyfuzji i szybkość właściwej reakcji chemicznej są zbliżone),

Szybkość procesów w układach wielofazowych zależy zwykle w znacznym stopniu od wielkości powierzchni podziału faz (tj. powierzchni zetknięcia faz), na której zachodzi reakcja.

dr hab. Beata Grabowska – Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

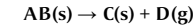
Czynniki wpływające na szybkość reakcji

- rodzaj reagentów (typ reakcji)
- stężenie reagentów
- ciśnienie gazowych reagentów
- temperatura
- katalizator
- promieniowanie elektromagnetyczne
- rodzaj rozpuszczalnika
- stopień rozdrobnienia substratów

dr hab. Beata Grabowska – Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

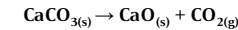
Kinetyka rozkładu ciał stałych

Rozkład ciał stałych pod wpływem temperatury można przedstawić kilkoma schematycznymi zapisami, lecz z punktu widzenia niniejszej pracy najważniejsza jest postać:



- Szybkość reakcji przechodzi przez maksimum
- Szybkość reakcji jest maksymalna w chwili jej rozpoczęcia
- Istotną rolę odgrywają makro- i mikrodefekty struktury

Rozkład węgla wapnia:



Szybkość reakcji rozkładu węglanów jest proporcjonalna do stopnia odstępstwa od stanu równowagi wyrażanego różnicą pomiędzy prężnością rozkładową $p_{CO_2}^r$, a aktualnie panującym ciśnieniem cząstkowym p_{CO_2} , w danej temperaturze oraz do wielkości powierzchni fazy reagującej:

$$v = k_r S (p_{CO_2}^r - p_{CO_2})$$

dr hab. Beata Grabowska – Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Wpływ temperatury na szybkość reakcji

Reguła van 't Hoffa

W przypadku reakcji homogenicznych często stwierdza się podwojenie (w przybliżeniu) szybkości reakcji przy każdym wzroście temperatury o 10°C.



Jacobus Henricus van 't Hoff
1852-1911

dr hab. Beata Grabowska – Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Wpływ temperatury na szybkość reakcji

Zależność stałej szybkości reakcji, a zatem **szybkości reakcji od temperatury**, określona jest **równaniem Arrheniusa** (1889 r.):

$$k = A \exp(-E_a / RT)$$

gdzie: A - stała, tzw. współczynnik częstości,
E_a - energia aktywacji.

Równanie Arrheniusa można stosować z powodzeniem do wielu reakcji w fazie gazowej, do reakcji zachodzących w roztworach skondensowanych, a także do reakcji heterogenicznych.

Po zlogarytmowaniu:

$$\ln k = \ln A - E_a / RT$$

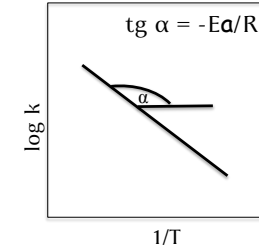


Svante August Arrhenius
1859-1927

Wpływ temperatury na szybkość reakcji

Na wykresie zależności log k od 1/T, którym jest linia prosta, o współczynniku kierunkowym (równym - E_a/R 2,303):

stała szybkości k (a tym samym i szybkość reakcji) rośnie z temperaturą, tym bardziej, im większa jest energia aktywacji (E_a).



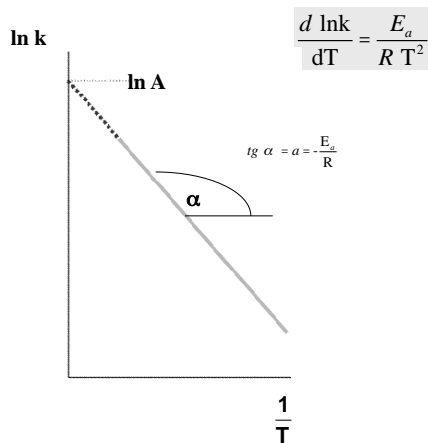
Przykładowo:

Wartości energii aktywacji dla reakcji chemicznych są zwykle rzędu kilkuset kJ/mol. Przyjmując dla tych procesów przeciętną wartość energii aktywacji 170 kJ/mol, otrzymamy na podstawie **równania Arrheniusa**:

$$\frac{\text{szybk.procesu400K}}{\text{szybk.procesu300K}} \approx \exp\left(-\frac{170000}{3330} + \frac{170000}{2490}\right) \approx 3,02 \cdot 10^7$$

Z powyższego równania widać jak znacznie zwiększa się szybkość procesu przy wzroście temperatury o 100 K.

Wpływ temperatury na szybkość reakcji



$$\frac{d \ln k}{dT} = \frac{E_a}{R T^2}$$

$$\ln k = -\frac{E_a}{R} \frac{1}{T} + \ln A$$

$$\ln k = a \frac{1}{T} + b$$

$$k = A e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

$$\ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

A - czynnik przedwykładniczy = czynnik częstości,

Teoria zderzeń aktywnych

Na podstawie **teorii zderzeń aktywnych** liczba zderzeń aktywnych „z” (a tym samym szybkość reakcji w danej temperaturze) można obliczyć, biorąc pod uwagę, że reagują ze sobą tylko te cząsteczki, które przy zderzeniu mają energię równą lub większą od pewnej wartości minimalnej, zwanej **energją aktywacji**, E_a:

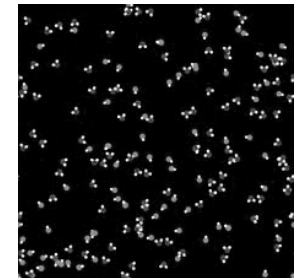
$$z = z_0 \exp(-E / RT)$$

gdzie:

z₀ - ogólna liczba zderzeń.

Zakładając, że szybkość reakcji, a ściślej biorąc stała szybkości reakcji k, jest określona przez liczbę zderzeń aktywnych z, otrzymamy:

$$k = z \exp(-E_a / RT)$$



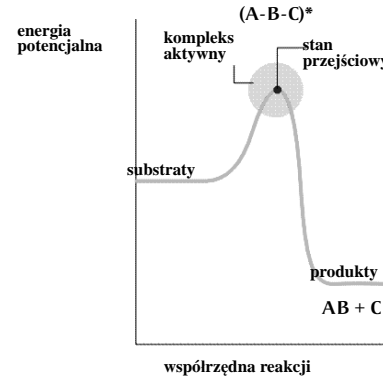
Teoria stanu pośredniego

- inaczej *teoria bezwzględnych szybkości reakcji* lub *teoria kompleksu aktywnego*,
- opiera się na ogólnym założeniu, że kiedy dwie cząsteczki reagujące, mające energie równą lub większą od energii aktywacji, zderzą się ze sobą wówczas tworzy się **kompleks aktywny**, który rozpada się samorzutnie na ostateczny produkt reakcji.
- teoria kompleksu aktywnego pozwala obliczyć stałą szybkości reakcji k , a tym samym szybkość reakcji.

dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Teoria kompleksu aktywnego

(H. Eyring, M.G. Evans, M. Polanyi - 1935)



Dla reakcji:
 $A + BC \rightarrow AB + C$

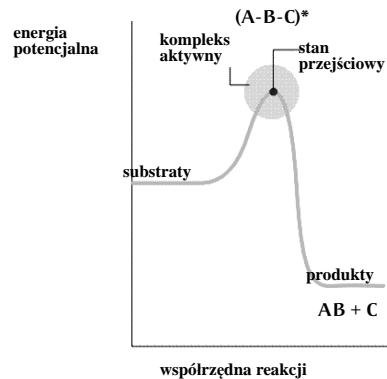
Wykres zmiany energii potencjalnej układu w zależności od drogi reakcji:

podczas zbliżania się atomu C do cząsteczki AB słabnie wiązanie AB, a jednocześnie zaczyna się tworzyć wiązanie BC.

Proces kończy się powstaniem cząsteczki BC i uwolnieniem atomu A, przed tym jednak układ musi przejść przez stan przejściowy, tworząc **kompleks aktywny (A-B-C)***, w którym atom B należy niejako jednocześnie do poprzedniej cząsteczki AB jak i nowej BC (pomiędzy kompleksem aktywnym (A-B-C)* a substratem (AB + C) ustala się równowaga termodynamiczna).

dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Teoria kompleksu aktywnego



Równanie cząsteczkowe, przedstawiające mechanizm procesu można napisać w następujący sposób:



lub wyrażając to samo słowami:

substraty = kompleks aktywny → produkty

dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Teoria kompleksu aktywnego

Na podstawie teorii stanu pośredniego zależność stałej szybkości reakcji k od temperatury można wyrazić następującym równaniem (stanowiącym odpowiednik prawa Arrheniusa):

$$k = A \exp(-E_a / RT) \quad [\kappa (kT/h) \exp(\Delta S^* / R)] \exp(-\Delta H^* / RT)$$

czyli:

$$E_a = \Delta H^*$$

gdzie: κ - współczynnik transmisji, który określa prawdopodobieństwo rozpadu kompleksu aktywnego na cząsteczki produktów,

k - stała Boltzmanna,

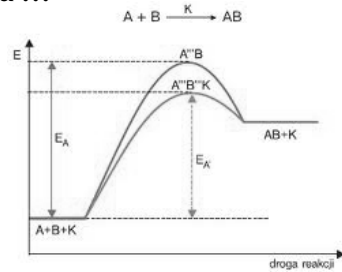
h - stała Plancka,

ΔS^* i ΔH^* - przyrost odpowiednio entropii i entalpii w procesie tworzenia się kompleksu aktywnego z substratów.

dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Reakcje katalizowane

Wpływ katalizatora ...



Przykłady reakcji katalizowanych ...

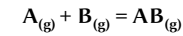
Rodzaje katalizatorów ...

dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

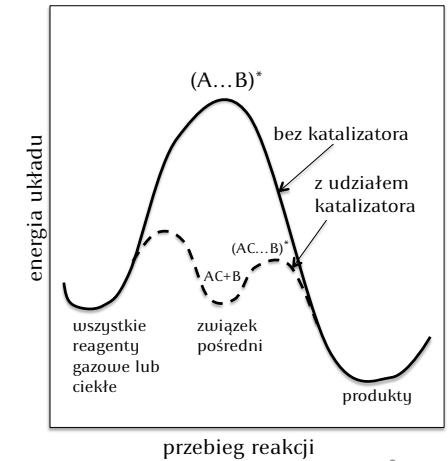
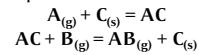
Zmiana energii układu dla reakcji zachodzącej bez katalizatora i z udziałem katalizatora

Przebieg zmiany energii potencjalnej układu dla reakcji bez udziału katalizatora i reakcji katalizowanej, w której są adsorbowane dwa reagenty $A_{(g)}$ i $B_{(g)}$.

Reakcje pomiędzy gazowymi reagentami A i B, bez udziału Katalizatora (C), przedstawia równanie:



W obecności katalizatora (C) ta sama reakcja będzie przebiegać w dwóch etapach:



dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

Literatura

- [1] A. Staronka. Chemia fizyczna. Wyd. AGH 1994 (i dalsze wydania).
- [2] K. Pigoń, Z. Ruziewicz: Chemia Fizyczna, PWN, Warszawa 2014.
- [3] E. Brian Smith: Basic chemical thermodynamics, Imperial College Press, 2014.
- [4] S. K. Bose, S. Roy: Principles of Metallurgical Thermodynamics, Universities Press 2014.
- [5] Strona internetowa: <http://home.agh.edu.pl/~graboska/>
- [6] Fotografie: <https://pl.wikipedia.org>

dr hab. Beata Grabowska - Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, WO AGH

koniec