

REAKCIÓKINETIKA

ALAPFOGALMAK

Reakciókinetika célja

1. Reakciók időbeli lefutásának, időbeliségének vizsgálata: miért gyors egy reakció, és miért lassú egy másik?
2. Hogyan függ a reakciók sebessége a hőmérséklettől?
3. Reakciók mechanizmusának felderítése (elemi reakciók, köztitermékek): milyen molekuláris történések, átalakulások vezetnek a kiindulási anyagokból a termékekbe?
4. Hogyan lehet egy reakciót hatékonyan megvalósítani?

Nulladik kérdés: Hogyan jellemezzük a reakciók sebességét?

A reakciósebesség definíciója

Reakciósebesség:

$$v = \frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{\nu_B} \frac{dn_B}{dt}$$

Reakciósebesség és valamely anyag átalakulási sebessége:

$$\frac{dn_B}{dt} = \nu_B \frac{d\xi}{dt}$$

Térfogategységre vagy felületre vonatkoztatott reakciósebesség:

$$\frac{v}{V} = \frac{1}{V} \frac{d\xi}{dt}$$

$$\frac{v}{A} = \frac{1}{A} \frac{d\xi}{dt}$$

Koncentrációváltozás sebessége:

$$\frac{dc_B}{dt} = \frac{d\left(\frac{n_B}{V}\right)}{dt} = \frac{1}{V} \frac{dn_B}{dt} - \frac{n_B}{V^2} \frac{dV}{dt}$$

Hátrányai:

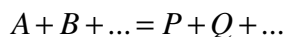
1. térfogatváltozás esetén nem alkalmazható
2. stacionárius körülmények között nem alkalmazható

Áramerősség, áramsűrűség: elektrokémia
Táblázatosan összefoglalva: RM. Jegyzet

mennyiség neve	definíciója	mértékegysége
reakciósebesség	$\frac{d\xi}{dt}$	$\frac{\text{mol}}{\text{s}}$
átalakulási sebesség	$\frac{dn_B}{dt}$	$\frac{\text{mol}}{\text{s}}$
koncentrációváltozás sebessége	$\frac{dc}{dt}$	$\frac{\text{mol}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}}$
térfogattal osztott reakciósebesség	$\frac{1}{V} \times \frac{d\xi}{dt}$	$\frac{\text{mol}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}}$
felületegységre vonatkoztatott reakciósebesség	$\frac{1}{A} \times \frac{d\xi}{dt}$	$\frac{\text{mol}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}$
áramerősség	$\frac{dq}{dt}$	A
áramsűrűség	$\frac{1}{A} \times \frac{dq}{dt}$	$\frac{\text{A}}{\text{m}^2}$

Reakciósebességi egyenlet, rendűség, molekularitás

Tapasztalati összefüggés a reakciósebesség és a reakcióban részt vevő komponensek koncentrációja között. Általában a koncentrációváltozás sebességével szokás az egyenletet felírni. Például egy



reakcióra:

$$\frac{dc_P}{dt} = k \cdot f(c_A, c_B, \dots, c_P, \dots).$$

A koncentráció jelölésére felcserélhető módon használjuk a c_A és az $[A]$ jelölést is.

A legegyszerűbb (de a gyakorlatban nagyon sokszor előforduló) esetekben a reakciósebességi egyenlet szorzat formában írható fel.

$$\frac{dc_P}{dt} = k c_A^{r_A} c_B^{r_B} \dots$$

A reakciósebességi egyenlet hatványkitevőinek összegét a reakció rendjének, az egyes kitevőket részrendeknek nevezzük.

$$r = r_A + r_B + \dots$$

Az arányossági tényező, k , a reakciósebességi együttható.

A reakciórend nem azonos a sztöchiometriai számokkal, s nem azonos a molekularitással sem. Nem feltétlenül egész szám.

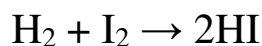
Sztöchiometriai szám: egy reakcióegyenletben a résztvevő komponensek részvételi arányára jellemző együttható. Kinetikailag nem informatív. A sztöchiometriai egyenleteket egyenlőségjellel írjuk fel, a kinetikai egyenleteket nyíllal jelöljük.

Figyelem!

Különbséget kell tenni a több lépésben lejátszódó reakciók és az egy lépésben lejátszódó ún. elemi reakciók között.

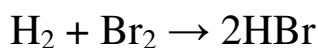
Az elemi reakcióban a kiindulási anyagok oldalán álló molekulák számát nevezzük az elemi reakció molekularitásának. (később pontosítunk!)
Egy molekula bomlása egy elemi reakcióban unimolekulás reakció.
Két molekula ütközése egy elemi reakcióban bimolekulás elemi reakció.

Példa másodrendű reakcióra:



$$\frac{d[\text{HI}]}{dt} = k[\text{H}_2][\text{I}_2]$$

Példa egy bonyolultabb reakcióra:



$$\frac{d[\text{HBr}]}{dt} = k \frac{[\text{H}_2][\text{Br}_2]^{3/2}}{[\text{Br}_2] + k'[\text{HBr}]}$$

- törtrendű reakció
- összetett reakció, több elemi lépésből áll
- egy tipikus bimolekulás elemi reakció:

