test PDF Combine only

Subject

Date

* در شیمی به بررسی تغییر موقعیت ذرات اتمی یا مولکولی در حین انجام تحولات شیمیایی برای ما مهم است.

$FeO + CO = Fe + CO_2$

تعدادی از سوزنهای Fe_2O_3 می شکنند و اکسیژن FeO می رود با CO واکنش می شود و آهن به عنوان محصول تولید می شود.

؟ سوال: چه عواملی روی سرعت واکنش تاثیر دارد است؟

☑ پاسخ: ① نوع و طبیعت واکنش دهنده ها و محصولات

مثلاً اگر طریه روی داشته باشیم که به راحتی در آب حل می شود با اگر طریه پالادیم داشته باشیم که اصلاً حل نمی شود (چرایی آن مربوط به همین مورد است)

خواص فیزیکی واکنش دهنده نیز مهم است مثلاً تعلق بودن یا تراکم بالای ... (یعنی مواد اتمیک یک نوع واکنش دهنده باید تعلق یک باد تراکم داشته باشیم). مواد تعلق سطح تماس بیشتری با مواد دیگر برقرار می کنند بنابراین در اینجا سرعت انجام واکنش نیز بیشتر است

② غلظت واکنش دهنده ها: افزایش آن طبیعتاً سرعت انجام واکنش نیز افزایش می یابد

③ درجه حرارت یا دما ↑ سرعت واکنش را افزایش می دهد. چه واکنش گرمازا باشد چه گرماگیر

* گرمازا یا گرماگیر بودن عت مربوط به ماهیت واکنش است.

④ کاتالیست ها ← مثبت ← افزایش سرعت

منفی ← کاهش سرعت ← به طور کلی برای واکنش های خوردگی (corrosion) از این کاتالیست ها استفاده می کنیم که سرعت های خوردگی آن کاهش یافته یا بازدارنده (inhibitors) نیز گفته می شوند. که معروف ترین بازدارنده: ضدیخ خودروها

⑤ انتقال جرم

⑥ همزدن

⑦ انرژی های خارجی ← هم زدن عت در آب که سرعت انجام واکنش مدنظر را افزایش می دهد.

Nevis

o test PDF Combine only

Subject

Date

واکنش های شیمیایی دسته ① همگن همه ی اجزای واکنش در یک فاز باشند (عمدتاً همه در حالت گازی باشند)

دسته ② غیرهمگن

مثال همگن:

$$H_2(g) + \frac{1}{2} O_2(g) \xrightarrow{Pt} H_2O(g)$$

*امروزه ان کاتالیست پلاتین (Pt) استفاده میشود غیرهمگن است.

مثال غیرهمگن:

$$FeO_{(s)} + CO_{(g)} \longrightarrow Fe_{(s)} + CO_{2(g)}$$

نحوه محاسبه سرعت واکنش های شیمیایی

سرعت است که محصولات با آن تولید یا واکنشگرهای با آن تمرین مصرف میشوند.

در سرعت با پارامترهای همسو زمان و دیگری غلظت است.

$$\frac{C}{t}$$

(concentration) (time)

$$A \longrightarrow P$$

تولید مصرف

قانون اول سرعت:

$$2A \longrightarrow B + C$$

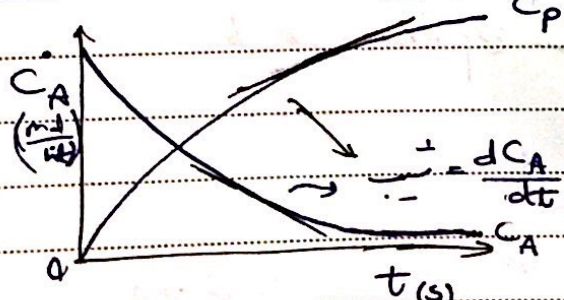
$$r = -\frac{1}{2}\frac{dC_A}{dt} = \frac{1}{1}\frac{dC_B}{dt} = \frac{1}{1}\frac{dC_C}{dt}$$

چون سرعت منفی نمیشود

اگر بخواهد غلظت برحسب زمان را رسم کنیم

در هر زمانی با محاسبه شیب خواهیم سرعت را محاسبه کنیم.

سرعت = تغییر غلظت بر حسب زمان



$$aA + bB \longrightarrow cC + dD \qquad -\frac{1}{a}\frac{dC_A}{dt} = -\frac{1}{b}\frac{dC_B}{dt} = \frac{1}{c}\frac{dC_C}{dt} = \frac{1}{d}\frac{dC_D}{dt}$$

o test PDF Combine only

Subject

Date

قابل توجه: سرعت پیشرفت یک واکنش در یک دمای معین متناسب است با غلظت واکنش دهنده‌ها به توان ضریب استکیومتری هر یک (در صورتی که واکنش بنیادی باشد. اگر نباشد بستگی به شرایط دارد.)

$$aA + bB + cC \longrightarrow P$$

$$r = -\frac{1}{a}\frac{dC_A}{dt} = K C_A^{\alpha} C_B^{\beta} C_C^{\gamma}$$

rate ← ثابت سرعت

α ، β ، γ : درجات جزئی واکنش (partial order)

درجه کلی واکنش overal order $\alpha + \beta + \gamma = n$

می‌تواند غیرصحیح (اعشاری) هم باشند

نکته ①: درجه واکنش لزوماً عدد صحیح نیست (اعداد غیرصحیح هم می‌توانند باشند)

نکته ②: در برخی واکنش‌ها همانطور که در بالا اشاره شد، درجه واکنش با ضریب استوکیومتری واکنشگر برابر است.

درجه جزئی

$$1A + 2B \longrightarrow P$$

$$r = K C_A^{1} C_B^{2}$$

} واکنش‌های ابتدایی ساده - بنیادی (Elementary)

منظور از واکنش‌های بنیادی (Elementary): به همان صورتی که نوشته می‌شوند انجام می‌شوند یا به عبارتی مکانیزمشان خودشان هستند.

$$H_2 + Br_2 = 2HBr$$

$$r = \frac{K_1 C_{H_2} \cdot C_{Br_2}^{1/2}}{K_2 + \frac{C_{HBr}}{C_{Br}}}$$

} واکنش پیچیده (Complex) طی چند مرحله انجام می‌شوند

$$r = K C_{H_2}^{\alpha} C_{Br_2}^{\beta} X$$

مثلاً

$$1A + 1B \longrightarrow AB^*$$

$$AB^* + 1B \longrightarrow P$$

} دو مرحله انجام شده (Complex) پیچیده

Nevis

To test PDF Combine only

«به نام او»

Subject سینتیک در مهندسی مواد

Date ۱۳۹۹/۰۷/۰۱ سه شنبه

«جلسه دوم»

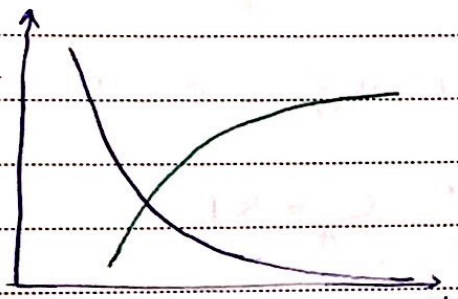
مرور جلسه گذشته

قانون اول

$$aA + bB \rightarrow cC$$

$$r = -\frac{1}{a}\frac{dC_A}{dt} = -\frac{1}{b}\frac{dC_B}{dt} = +\frac{1}{c}\frac{dC_C}{dt}$$

قانون دوم



$$aA + bB \rightarrow P$$

$$r = K C_A^{\alpha} C_B^{\gamma}$$

مرحله ابتدایی: $\begin{cases} \alpha = a \\ \gamma = b \end{cases}$

تعادل از دیدترمودینامیک کلاسیک: زمانی سیستم به تعادل رسیده که در آن سیستم دیگر واداشته نشود

تعادل از دیدگاه سینتیک: برابری سرعت های رفت و برگشت در واکنش

انرژی آزاد گیبس minimum ($\Delta G = 0$)

واکنش: $A + B \underset{K_2}{\overset{K_1}{\rightleftharpoons}} R + S$

واکنش ساده (Elementary)

f: forward

b: backward

سرعت رفت $= r_f = K_1 C_A \cdot C_B$

سرعت برگشت $= r_b = K_2 C_R \cdot C_S$

تعادل: $r_f = r_b \Rightarrow \frac{K_1}{K_2} = \frac{C_R^e \cdot C_S^e}{C_A^e \cdot C_B^e} = K_e$

ارتباط بین ترمودینامیک و سینتیک در ترمودینامیک ثابت تعادل

صحیح‌ترین رابطه ارتباط بین ترمودینامیک (ثابت تعادل) و سینتیک (ثابت سرعت) را بیان می‌دهد.

C_R ⇒ غلظت R در هر لحظه از واکنش

C_R^e ⇒ غلظت R در لحظه تعادل

محاسبه سرعت واکنش‌های غیر الموسیل

هر چه درجه واکنش نسبت به ماده سرعت ساده‌تر است.

① واکنش غیر الموسیل درجه صفر

$A \rightarrow P$

درجه واکنش نسبت به A، صفر است.

تعادل از دیدترمودینامیک آماری: انرژی ماکزیمم باشد و انرژی آزاد گیبس ثابت باشد.

دو تعادل پایدار (انرژی) ① ترجیح انرژی ② ترجیح درجات آزادی: طبیعی که محتمل‌ترین حالت حالت تعادل است.