Эта часть работы выложена в ознакомительных целях. Если вы хотите получить работу полностью, то приобретите ее воспользовавшись формой заказа на странице с готовой работой:
https://stuservis.ru/kursovaya-rabota/388396

Тип работы: Курсовая работа

Предмет: Физическая химия

Термины и определения 3
Введение 5
1. Теоретическая часть. Теория активированного комплекса 8
1.1. Основные допущения 8
1.2. Вывод основного уравнения ТАК 10
1.3. Термодинамический аспект теории активированного комплекса 15
1.4. Энергия активации ТАК и опытная энергия активации 17
1.5. Оценка стерического фактора с помощью ТАК 18
1.6. Применение теории активированного комплекса для биологических систем 20
2. Практическая часть. Взаимодействие молекул водорода и йода 24
2.1. Механизм реакции взаимодействия молекул водорода и йода по ТАС и ТАК 24
2.2. Вычисления константы скорости для реакции H2 + I2 = 2 HI 26
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ 33

Термины и определения

В настоящей курсовой работе используются следующие термины с соответствующими определениями:
Активированный комплекс, или переходное состояние – все конфигурации ядер, соответствующие малой области вблизи максимума на профиле потенциальной энергии для реакции [1].
Координата реакции – одномерная кривая, характеризующая путь с наименьшей энергией, по которому происходит реакция [2].
Механизм химической реакции – совокупность простых реакций (стадий), по которым протекает реакция [2].
Поверхность потенциальной энергии (ППЭ) – потенциальная энергия молекулярного комплекса как функция геометрических координат атомов [2].
Сложные реакции – реакции, механизм которых включает две и более стадий [3].
Скорость реакции (r) – число актов превращения (или числа молей n) в единице объема (V) в единицу времени (t):
формула,
где □i – стехиометрический коэффициент. Если объем реагирующей системы постоянный, то
формула [3].
Критическая энергия (пороговая энергия) – минимальная энергия, которую нужно подвести к молекуле для того, чтобы она могла претерпеть химическое превращение [2].
Профиль потенциальной энергии – кривая, описывающая изменение потенциальной энергии системы атомов, составляющих реагенты и продукты реакции, как функция координаты реакции [2].
Путь реакции – траектория от реагентов к продуктам на ППЭ [2].
Энергия активации – это минимальная энергия, которой должны обладать реагирующие молекулы, чтобы их столкновение приводило к химическому взаимодействию [4].

Введение

Теорию переходного состояния разработали Эйринг, Эванс, Поляни (1935 г.). Любая теория кинетики нацелена на расчет абсолютных скоростей химических реакций.
В теории переходного состояния последнюю называют также теорией абсолютных скоростей реакций, или теорией активированного комплекса (ТАК) делается попытка расчета скорости химической реакции. Расчет базируется на термодинамике процесса столкновений, перераспределении энергии и химических связей.
Теория активированного комплекса является дальнейшим развитием теории активных столкновений (ТАС), которая не смогла объяснить реакции, у которых стерический множитель намного больше единицы. Она углубляет теорию активных столкновений, дополняя ее новыми понятиями.
В обеих теориях наличие избытка энергии у реагирующих частиц при столкновении приводит к

химическому акту. Теория бинарных столкновений рассматривает только результат столкновения, но не сам его акт. В отличие от нее теория активированного комплекса рассматривает энергетику акта соударения молекул. Система, обладающая избытком энергии, переходит в менее устойчивое состояние. После столкновения через некоторое время совершается перераспределение химических связей в исходных молекулах и образование молекул продуктов реакции, т. е. происходит химическое взаимодействие.
Для данного акта в теории вводится понятие о переходном состоянии, или активированном комплексе, которое является промежуточным между исходными и конечными молекулами. Переходное состояние характеризуется постоянно меняющимися во времени расстояниями между образующими его молекулами. Такой подход позволил количественно описать динамику элементарного акта, тем самым дав возможность для расчета абсолютных величин констант скоростей. Расчеты константы скорости по ТАК проводят, вычисляя суммы по состояниям по молекулярным данным (обычно полученным из спектроскопических измерений). Это является важным и значимым, не теряет актуальность и в настоящее время. Прежде всего выражение константы скорости через термодинамические величины позволяет рассчитывать изменение энтропии активации по опытной величине энергии активации. В зависимости от знака изменения энтропии при образовании активированного комплекса при одной и той же величине энергии активации константа скорости может быть больше или меньше. Образование жесткого циклического комплекса будет приводить к потере энтропии, а разрыхление, удлинение связи увеличит энтропию. Таким образом, мы получаем возможность делать предположения о природе АК.
Введение энтропии в расчеты константы скорости позволяет понять причину, по которой некоторые ферментативные реакции при значительной величине энергии активации идут с большой скоростью даже при комнатной температуре, или при сопоставимой энергии активации протекают значительно быстрее, чем взаимодействие в растворе с участием иона (гемоглобин, содержащий ион железа). Причина в значительной величине положительного изменения энтропии при распаде активированного комплекса.
Термодинамическое рассмотрение ТАК позволило понять также такой опытный факт, как зависимость константы скорости от давления для некоторых реакций, хотя по определению этого не должно быть [5].
Цель данной работы рассчитать константу скорости реакции взаимодействия водорода и йода, используя положения теории активированного комплекса.
Для достижения цели необходимо выполнить следующие задачи:
1. В теоретической части:
1.1. Рассмотреть основные положения теории активированного комплекса и вывести уравнение для расчета константы скорости.
1.2. Провести оценку энергии активации ТАК и опытной энергии активации
1.3. Провести оценку стерического фактора с помощью ТАК.
1.4. Рассмотреть применение ТАК для решения актуальных проблем при изучении биологических систем.
2. В практической части:
2.1. Рассмотреть механизм реакции взаимодействия водорода и йода по ТАС и ТАК.
2.2. Рассчитать константу скорости данной реакции.
2.3. Сопоставить полученные результаты с литературными данными.

1. Теоретическая часть. Теория активированного комплекса

Для понимания сущности проблемы необходимо начать рассмотрение с теоретических основ. Для описания теоретической части воспользуемся учебниками и учебными пособиями по физической химии [1, 4-7].
Вывод основного уравнения теории активированного комплекса, с привлечением аппарата статистической термодинамики, состоит в предположении существования равновесия между реагентами и активированным комплексом.
Реакция представляется как последовательная, в которой активированный комплекс является промежуточным веществом и рассматривается стационарное состояние процесса (наличие размытого максимума на кривой концентрации промежуточного вещества от времени), в котором концентрация промежуточного вещества практически неизменна.

1.1. Основные допущения

1. В результате столкновений частиц-реагентов (атомов, молекул) в системе создается равновесная концентрация самых невыгодных по энергии конфигурации – активированных комплексов. Частицы-реагенты и активированные комплексы равновесно распределены по своим поступательным, вращательным, колебательным степеням свободы.
2. Любая конфигурация, достигшая в своем движении вдоль пути реакции состояния активированного

комплекса, непременно превратится в продукты.
3. Движение конфигурации (фигуративной точки системы) вдоль пути реакции происходит как поступательное движение одномерного идеального газа.

1. Макарова, Л. Л. Химическая кинетика и катализ : учеб.-метод. пособие. – Ижевск: Изд. центр Удмуртский университет, 2019. – 144 с.
2. Воронцов, А. В. Основные понятия и формулы химической кинетики : методическое пособие / А. В. Воронцов, А. Г. Окунев. – Новосибирск : Редакционно-издательский центр НГУ, 2009. – 118 с.
3. Тюрин, А. Г. Решение задач по химической кинетике и катализу: практикум для самостоятельной работы : учеб. пособие / А. Г. Тюрин, С. Е. Працкова. – Челябинск : Изд-во Челяб. гос. ун-та, 2013. – 95 с.
4. Стромберг, А. Г. Физическая химия : учебник для вузов / А. Г. Стромберг, Д. П. Семченко ; под ред. А. Г. Стромберга. – Изд. 7-е, стер. – М. : Высш. шк., 2009. – 526 с.
5. Федорова, А. А. Теории элементарного химического акта. Кинетика цепных и фотохимических реакций. Катализ. Курс лекций по физической химии : учеб. пособие / А. А. Федорова, М. П. Немцева. – Иваново : Изд-во Иван. гос. хим.-технол. ун-та, 2019. – 95 с.
6. Кубасов, А. А. Химическая кинетика и катализ. Ч. 2. Теоретические основы химической кинетики : учебное пособие / А.А. Кубасов. – М. : МГУ, 2005. – 158 с.
7. Физическая химия. В 2 т. Т. 2. Электрохимия. Химическая кинетика и катализ : учеб. для вузов / К. С. Краснов, Н. К. Воробьев, И. Н. Годнев [и др.]. – 3-е изд., испр.. – М. : Высш. шк., 2001. – 319 с.
8. Иванова, Е. В. Физическое моделирование для оценки воздействия микроимпульсных режимов лазерного излучения на хориоретинальный комплекс человеческого глаза на основе теории активированного комплекса / Е. В. Иванова, П. Л. Володин // Лазерная медицина. – 2022. – № 26(3-4). – С. 47-55.
9. Векшин, Н. Л. Электрон-колебательные возбужденные комплексы в ферментативных реакциях / Н. Л. Векшин // Биофизика. – 2020. – Т. 65, № 2. – С. 412-416.
10. Нетесова, Г. А. Вязкость растворов свекловичного пектина / Г. А. Нетесова, В. В. Котов, И. М. Бодякина, А. Л. Лукин // Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия. Биология. Фармация. – 2013. – №. 1. – С. 36-40.
11. Пен, В. Р. Принцип линейности свободных энергий в кинетике делигнификации древесины / В. Р. Пен, И. Л. Шапиро // Современные наукоемкие технологии. – 2008. – №. 6. – С. 20.
12. Сафенкова, И. В. Применение атомно-силовой микроскопии для характеристики единичных межмолекулярных взаимодействий / И. В. Сафенкова, А. В. Жердев, Б. Б. Дзантиев //Успехи биологической химии. – 2012. – Т. 52. – С. 281-314.
13. Murina, M. A. The Antiplatelet Effect and Chemical Activity of N6- Chloroadenosine Phosphate / M. A. Murina, D. I. Roshchupkin, V. I. Sergienko // Biophysics. – 2021. – Vol. 66. – P.535–540.
14. Клестова-Надеева, Е. А. Теоретическое изучение реакции нуклеофильного присоединения оксимов к нитрильным комплексам транс-/цис-[ReCl4(NCCH3)2] / Е. А. Клестова-Надеева, М. Л. Кузнецов, А. И. Дементьев // Журнал неорганической химии. – 2005. – Т. 50, №. 4. – С. 651-659.
15. Буданов, В. В. Об изложении теории активированного комплекса в курсе физической химии и расчетах активационных параметров химических реакций / В. В. Буданов // Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология. – 2007. – Т. 50, №. 6. – С. 117-120.
16. yandex : сайт. – URL: https://korobov.chem.msu.ru/uploads/relation-of-energy-and-energy-of-activation-13022022.pdf (дата обращения: 27.11.2023)
17. Дудоров, В. В. Роль представления о микроравновесном состоянии химической связи в создании новых моделей расчета констант скоростей реакций в газовой фазе / В. В. Дудоров, Т. А. Мельчакова, А. Р. Мишанов // "Математика. Компьютер. Образование". Сб. трудов XII международной конференции 2005 . – Том 3. – Ижевск : Научно-издательский центр "Регулярная и хаотическая динамика", 2005. – С. 1079-1088.

Эта часть работы выложена в ознакомительных целях. Если вы хотите получить работу полностью, то приобретите ее воспользовавшись формой заказа на странице с готовой работой:
https://stuservis.ru/kursovaya-rabota/388396