Χημική κινητική

Χημική κινητική - Θεωρητικό υπόβαθρο:

Χημική κινητική είναι ο κλάδος της Χημείας ο οποίος ασχολείται:
- με τη μελέτη της ταχύτητας με την οποία εξελίσσονται οι αντιδράσεις,
- με τους παράγοντες που επηρεάζουν την ταχύτητα των αντιδράσεων,
- με το μηχανισμό της αντίδρασης, δηλαδή με τα ενδιάμεσα στάδια που ακολουθεί η αντίδραση όταν τα αντιδρώντα μετατρέπονται σε προϊόντα.

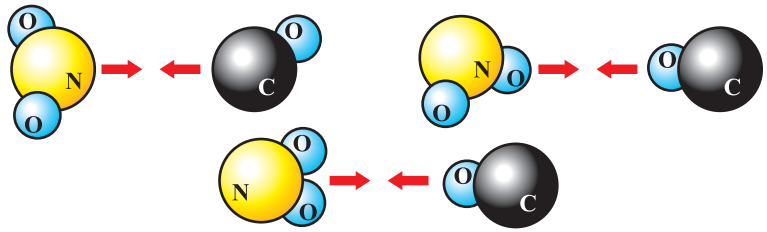
Η χημική κινητική αντλεί δεδομένα από πειραματικές μετρήσεις και όχι από τις χημικές εξισώσεις των αντιδράσεων.

- **Θεωρία συγκρούσεων:**

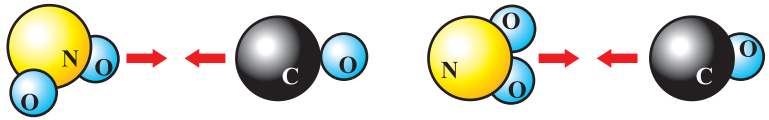
Τα σωματίδια των αντιδρώντων (άτομα, μόρια ή ιόντα) για να αντιδράσουν μεταξύ τους θα πρέπει να συγκρουστούν αποτελεσματικά. Για να είναι μία συγκρουση αποτελεσματική πρέπει τα σωματίδια να έχουν τον κατάλληλο προσανατολισμό και μία ελάχιστη τιμή ενέργειας η οποία ονομάζεται **ενέργεια ενεργοποίησης (E_a)**.

Κατά τη διάρκεια μίας αντίδρασης πραγματοποιείται ένας τεράστιος αριθμός συγκρούσεων. Από αυτές, ένας πολύ μικρός αριθμός δίνει προϊόντα, αποτελεσματικές συγκρούσεις, ενώ οι υπόλοιπες, μη αποτελεσματικές συγκρούσεις, δεν δίνουν προϊόντα.

Μη αποτελεσματικές συγκρούσεις:



Αποτελεσματικές συγκρούσεις οδηγούν σε προϊόντα:



$$NO_2 + CO \rightarrow NO + CO_2$$

Είναι προφανές ότι **όσο μεγαλύτερος είναι ο αριθμός των αποτελεσματικών συγκρούσεων, τόσο μεγαλύτερη είναι και η ταχύτητα μίας αντίδρασης**.

Δηλαδή η ταχύτητα μιας αντίδρασης καθορίζεται από τη <u>συχνότητα των αποτελεσματικών συγκρούσεων</u>.

$$A + B \rightarrow \text{προϊόντα}$$

Για να μπορεί να είναι αποτελεσματική η σύγκρουση των μορίων Α και Β θα πρέπει:

$$\mathbf{Εκιν_{(A)} + Εκιν_{(B)} \geq Ea}$$

Περίπου 1 στις 10^8 συγκρούσεις είναι αποτελεσματική!

Στις αποτελεσματικές συγκρούσεις γίνεται:
α) Διάσπαση δεσμών στα αντιδρώντα
β) Ανακατανομή ατόμων-ηλεκτρονίων
γ) Δημιουργία δεσμών στα προϊόντα

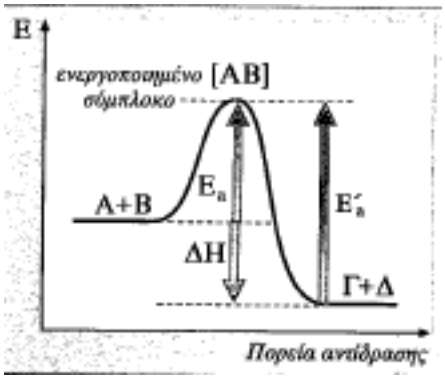
Ενέργεια ενεργοποίησης (Ea):
Η ελάχιστη (κινητική) ενέργεια που πρέπει να έχουν τα αντιδρώντα ώστε η σύγκρουσή τους να μπορεί να είναι αποτελεσματική.

Συχνότητα συγκρούσεων: ο αριθμός των συγκρούσεων ανά μονάδα όγκου και στη μονάδα του χρόνου.

Παρατήρηση:
Στις αποτελεσματικές συγκρούσεις σπάνε οι αρχικοί δεσμοί μεταξύ των σωματιδίων των αντιδρώντων και δημιουργούνται νέοι μεταξύ των σωματιδίων των προϊόντων.

Ενέργεια ενεργοποίησης (Ea):
Η ελάχιστη κινητική ενέργεια των αντιδρώντων ώστε να μπορέσει, κατά τη σύγκρουσή τους, να σχηματιστεί η μεταβατική κατάσταση
ή
Η διαφορά ενέργειας μεταξύ μεταβατικής κατάστασης και αντιδρώντων.
Πάντα είναι **Ea>0**.

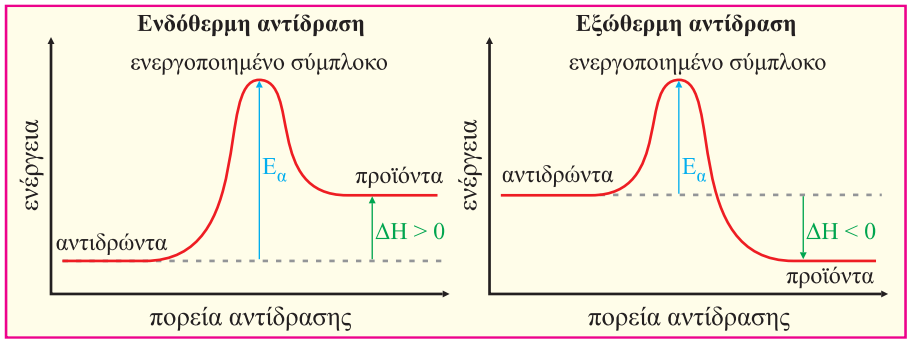
Τα ενεργειακά διαγράμματα που παρουσιάζονται αφορούν σε στοιχειώδεις ή απλές αντιδράσεις (πραγματοποιούνται σε ένα στάδιο). Μία πολύπλοκη αντίδραση έχει τόσες μεταβατικές καταστάσεις όσα είναι και τα ενδιάμεσα στάδια μέσω των οποίων πραγματοποιείται.



- **Θεωρία μεταβατικής κατάστασης:**

Κατά τη σύγκρουση των σωματιδίων των αντιδρώντων δημιουργείται ένα ασταθές ενδιάμεσο προϊόν, το οποίο ονομάζεται **ενεργοποιημένο σύμπλοκο** το οποίο απορροφά την ενέργεια ενεργοποίησης. Το ενεργοποιημένο σύμπλοκο λέγεται και **μεταβατική κατάσταση.**

Σε όλες τις αντιδράσεις, ενδόθερμες ή εξώθερμες, το ενεργοποιημένο σύμπλοκο έχει μεγαλύτερη ενέργεια απο τα αντιδρώντα και τα προϊόντα. Παρακάτω φαίνονται τα ενεργειακά διαγράμματα μίας εξώθερμης και μίας ενδόθερμης αντίδρασης, σύμφωνα με τη θεωρία της μεταβατικής κατάστασης:



Η αντίδραση Α + Β → Γ + Δ με ενέργεια ενεργοποίησης Ea είναι εξώθερμη (ΔΗ<0).

Τότε η αντίστροφη αντίδραση Γ + Δ → Α + Β με ενέργεια ενεργοποίησης Ea΄ είναι ενδόθερμη (ΔΗ΄>0) και μάλιστα ΔΗ΄=-ΔΗ. Προφανώς Ea΄ > Ea > 0.

Για την αντίδραση Α + Β → Γ + Δ ισχύει ΔΗ = Ea - Ea΄ < 0
Για την αντίδραση Γ + Δ → Α + Β ισχύει ΔΗ΄= Ea΄- Ea > 0

Παρατήρηση: Μεταξύ δύο αντιδράσεων της *ίδιας μορφής* που πραγματοποιούνται στις *ίδιες συνθήκες*, πιο γρήγορη είναι αυτή που έχει μικρότερη Ea.