**Лекция 11 Поверхность потенциальной энергии химической реакции, модель Эйринга и Поляни для кинетичекого анализа сложных реакций.**

**Цель:** познакомить с основными идеями теории активированного комплекса

**Поверхность потенциальной энергии реакции**

В процессе сближения реагирующих молекул изменяется расстояние между А-В и В-С и соответственно их потенциальная энергия. Если изобразить графическую зависимость изменения расстояний АВ и ВС и третью зависимость изменения соответственно потенциальной энергии частиц (рисунки 1,2), то получится трехмерное приближение, и если провести проекцию на изоэнергетическую линию (Епотенц=const), то можно получить поверхность потенциальной энергии реакции А+ВС→АВ+С, рисунок 1.

δ

P

P1

P2

A + BC

AB + C



P1

P

P2

60

50

40

30

26

26

25

20

30

40

50

25

20

10

# Рисунок 1 – Карта поверхности потенциальной энергии (ППЭ) для трехатомной системы А+ВС→АВ+С.

# Рисунок 2 – Профиль изменения потенциальной энергии или координата реакции А+ВС→АВ+С

На энергетической карте можно выделить долину Р1, в которой система А+ВС находится до реакции и долину Р2, в которой находятся АВ+С, образующиеся после реакции. Для перехода системы из Р1 в Р2, она должна преодолеть энергетический барьер и пойти через наиболее выгодный энергетический путь, т.е. через ложбину Р. Точка Р и рядом находящиеся участки - это область существования промежуточного активированного комплекса, который отличается неустойчивостью по сравнению с молекулами в долине Р1 и Р2. Активированный комплекс обладает дополнительными степенями свободы, чем молекулы, находящиеся в Р1 и Р2 и поэтому, совершив половину колебаний, он скатывается по энергетической диаграмме с Р в Р2, распадаясь на продукты реакции. Разность потенциальной энергии между Р1 и Р равна энергии активации (), обладая которой, молекулы в состоянии преодолеть потенциальный барьер и перейти в конечные продукты. Это хорошо видно из профиля этой реакции, рисунок 2. Теперь, когда раскрыли физический смысл поверхности потенциальной энергии (ППЭ), химическая реакция атома А и двухатомной молекулы ВС может быть представлена как движение фигуративной точки по этой поверхности. Поскольку ППЭ не имеет пересечений сама с собой, то каждая ее точка соответствует некоторому определенному и конечному значению потенциальной энергии U, которая является непрерывной и однозначной функцией межъядерных расстояний А-С и А-В. Вполне очевидно, что на данной ППЭ каждая индивидуальная пара реагирующих частиц А + ВС движется по своей траектории, заданной начальными условиями. Поэтому на этой поверхности появляется множество (порядка 1023) разных траекторий, причем не только реакционных, но и «возвратных» в исходные состояния. В тоже время и для реакционных траекторий вероятность превращения реагентов в продукты далеко не одинакова. Она максимальна, когда траектория фигуративной точки проходит по дну долины реагентов через перевальную точку Р и по дну долины продуктов АВ и С. Это особая траектория, соответствующая минимальному изменению потенциальной энергии, обозначается как **путь реакции**. Когда система А + ВС, двигаясь вдоль пути реакции, оказывается в непосредственной близости от точки Р на ППЭ, она приобретает конфигурацию, где ужу не существует исходной молекулы ВС, но еще и нет молекул АВ. Атом В в этой конфигурации в равной степени принадлежит и атому С и атому А. Это состояние, в котором межатомные расстояния близки друг к другу, называется **переходным**, а ядерная конфигурация - **активированным комплексом**.

Литература

1. Оспанова А.К., Шабикова Г.Х., Сыздыкова Л.И. Теории и проблемы физической химии. Алматы. Изд-во КазНУ им. Аль-Фараби. 2021. С.191

2. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия. М.: Высшая школа, 2003.-527. 193 экз.

3.Дамаскин Б.Б., Петрий О.А., Цирлина Г.А. Электрохимия. – М.: Химия, Колос С, 2006. – 672 с..25 экз.