### **Лекция 9**

### **Цель:** познакомить с теоретическими основами теории активных столкновений

### 

### **Основы теория активных столкновений**

Важным положением в теории ТАС является предположение о том, что скорость химической реакции прямо пропорциональна числу активных столкновений, т.е. .

Теория активных столкновений основана на определении скорости реакции, исходя из знания двух величин: числа общих столкновений  в единицу времени в единице объема и числа активных столкновений  или долю столкновений, при которых молекулы обладают энергией не ниже энергии активации ().

Теория активных столкновений применима к бимолекулярным реакциям и основана на кинетической теории газов. Автором этой теории является Льюис (1918 г.).

**Эффективный диаметр столкновений**

Для того чтобы молекулы столкнулись, они должны приблизиться друг к другу на расстоянии их ионных радиусов и находиться внутри цилиндра имеющего усредненный диаметр, равный полусумме диаметров реагирующих частиц: , где - эффективный диаметр столкновений – наименьшее расстояние между центрами сталкивающихся молекул при отсутствии взаимодействия. Величина  - называется сечением соударения.

**Полное число столкновений одинаковых молекул**

Согласно молекулярно-кинетической теории газов полное число столкновений одинаковых молекул за 1 секунду в 1 м3 соответствует:

 , (молекул х м3 /с), (1)

где n - число молекул А в м3 ; m - масса частиц , кг.

Если брать во внимание радиусы молекул, то

, (2) где МА – молярная масса.

**Полное число столкновений молекул разных видов**

Если в системе реагируют молекулы двух разных видов, то полное число столкновений ZAA соответствует:

(молекул х м3/с) (3),

где  - число молекул А и В соответственно в 1 м3, - усредненный диаметр равный . Так как - приведенная масса, то уравнение (3) можно записать как:

 (молекул х м3/с) (4)

Через радиусы молекул уравнение (3) запишется следующим образом:

 (5)

**Скорость химической реакции согласно теории активных столкновений**

Согласно теории активных столкновений по Льюису скорость зависит от числа активных столкновений: и записывается в следующем виде:

 (молекул/м3⋅с) (6)

Если сА=сВ=1, то W=K, поэтому при nA=nB=1 константа скорости согласно теории ТАС определяется по уравнению:

 (7)

Размерность константы скорости в системе СИ соответствует м3 с-1 . При умножении этого выражения на число Авогадро (NA) и коэффициент пересчета м3 в дм3 (л) получается размерность константы скорости, выраженная в м -1с-1.

 103 (м -1с-1) (8)

Это уравнение, сыгравшее выдающую роль в развитии химической кинетики, было впервые получено М.Траутцем ( Германия) в 1916г. и независимо У.Льюисом (Англия) в 1918 г., хотя и отличным от изложенного способом. Поэтому оно носит имя обоих ученых – уравнение Траутца-Льюиса. Значение уравнения Траутца-Льюиса состояло прежде всего в том, что оно указало реальный, хотя и полуэмпирический, путь теоретического расчета скоростей химических реакций на основе молекулярных постоянных реагирующих частиц - их размеров и масс.

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.