

УРАВНЕНИЯ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

Уравнения химической кинетики Имеют много геометрических свойств, которые плохо соответствуют наивной интуиции.

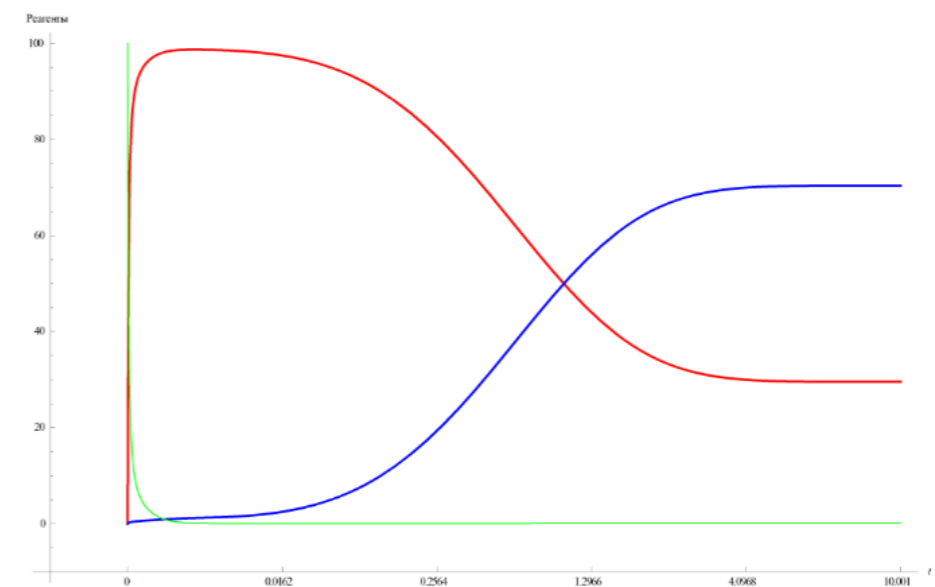
1. Общепринято считать, любая химическая реакция должна со временем стремиться к своему (единственному) равновесию. Однако, строгой математической теоремы, видимо, в литературе нет.

2. Более того, известны в некотором смысле противоречащие примеры. Скажем Реакция Белоусова-Жаботинского — класс химических реакций, протекающих в колебательном режиме, при котором некоторые параметры реакции (цвет, концентрация компонентов, температура и др.) изменяются периодически, образуя сложную пространственно-временную структуру реакционной среды. Внимательный анализ этого примера показывает, что эта система, видимо, не замкнута, и поэтому, рано или поздно прекращает свой периодический режим.

3. Слабые ингибиторы могут подавлять быстродействующий реакции. Ингибитор — это вещество, замедляющее или предотвращающее течение какой-либо химической реакции. Смотрим временную динамику в случае, когда реагенты a и b в химической реакции ингибируются двумя независимыми ингибиторами c и d : $ab \rightleftharpoons k_1 \cdot a \cdot b$, $ac \rightleftharpoons k_2 \cdot a \cdot c$, $bd \rightleftharpoons k_3 \cdot b \cdot d$. Пусть $k_1 = 10000$; $k_2 = 10$; $k_3 = 10$; $a_0 = 100$; $b_0 = 100$; $c_0 = 200$; $d_0 = 200$; причем изначально ингибиторов имеется по 200 штук каждый.

Коэффициент реактивности взят в 1000 раз больший, чем коэффициент ингибиции. Казалось бы, что реакция быстро достигнет равновесия. Ан нет! Сначала реакция достигает уровня, так, как если бы ингибиторов не было, а потом, хотя и медленно, уровень синтеза уменьшается до некоторого меньшего значения, раза в три меньшего, чем уровень при отсутствии ингибитора.

На графике красная линия соответствует количеству вещества ab , синяя линия соответствует ac , зеленая — $a = b$. Видно, что за короткое время реакция создает вещество ab , причем ингибиторы практически не влияют на реакцию. Но потом ситуация коренным образом изменяется: ингибиторы “откусывают” реагенты, и количество ab уменьшается примерно в 3 раза.



Это один из примеров того, как можно использовать слабые ингибиторы для подавления быстро протекающих реакций.