

反応化学

化学動力学

kinetics } dynamics } mechanics
kinematics }
statics }

反応速度論

1

2

(例) ロケット燃料の爆発

速い反応

3

(例) 鉄が錆びる

遅い反応

4

(例) 花火

速い反応

5

(例) 鍾乳洞

遅い反応

6

化学反応

速い反応

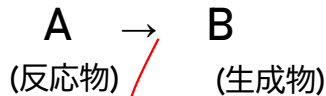


遅い反応



7

例:



突然 A → B になる？

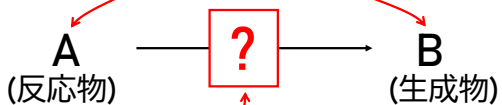


徐々に //



8

どんな物質が解析可能

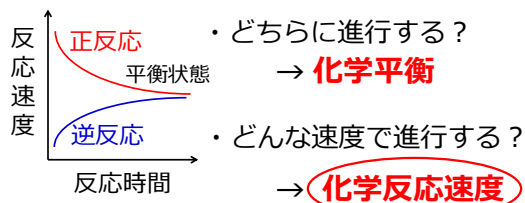


複雑な変化

反応が進行する速度で解析する
(=物質量の時間変化)

→ 反応速度論

9

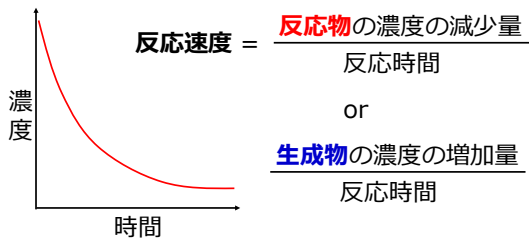


効率よい材料合成のために重要

10

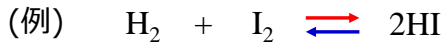
反応速度

- 単位時間当たりの
反応物または生成物の変化量



11

反応速度式



右向き の 反応の反応速度式

$$v_1 = k_1 [\text{H}_2] [\text{I}_2]$$

左向き の //

$$v_2 = k_2 [\text{HI}]^2$$

[]: 濃度 v_1, v_2 : 反応速度
 k_1, k_2 : 反応速度定数

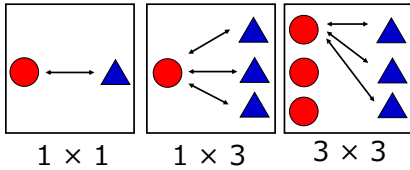
温度, 触媒によって変化

12

反応速度と濃度

(例) 2種類の分子の反応 (● ▲)

反応容器



1 × 1

1 × 3

3 × 3

分子の衝突

1 回

3 回

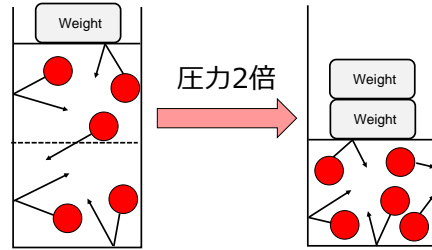
9 回

頻度が増えると反応速度も速くなる

→ **濃度の積に比例**

13

濃度と分圧 (※気体反応の場合)



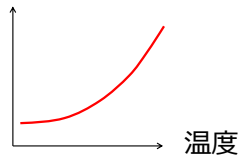
- ・体積が半分
- ・濃度が2倍

14

反応速度と温度

- ・温度に依存
- ・温度が上昇するほど速くなる

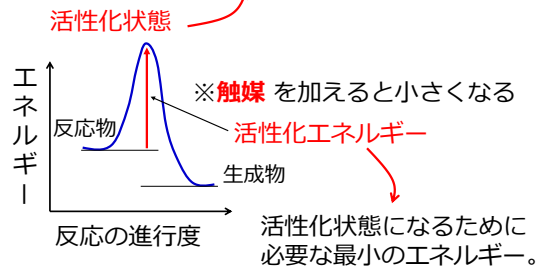
反応速度定数 k



15

活性化状態

反応に都合の良い衝突のできるエネルギーの高い状態。



16

反応速度論

目的

反応の速度が反応によって異なり、また条件によっても変わるのなぜか、を明らかにする。

最終目標

化学反応に関与している分子、原子の性質から実際に起こる反応速度を予測できるようにする。

17

反応の進行をどのように観察するか？

- ✓ 分光光度法
- ✓ 電気伝導率
- ✓ pH
- ✓ 圧力

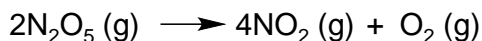
など

18

圧力の変化で 反応を解析する。

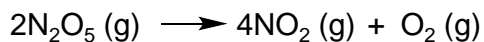
19

一定体積での気相分解反応：



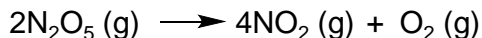
で全圧がどのように変化するかを予想せよ。

20



全圧は気相分子の数に比例する。反応が完全に終了したとき、圧力は5/2倍に上昇する。

21



初期圧力を p_0 として、 N_2O_5 分子の最初物質量を n で表す。 N_2O_5 分子のうち α という割合だけ分解したとき、反応混合物中の各成分の物質量は、

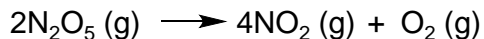
N_2O_5	NO_2	O_2	合計
$n(1 - \alpha)$	$2\alpha n$	$\frac{1}{2}\alpha n$	$n\left(1 + \frac{3}{2}\alpha\right)$

$\alpha=0$ のとき、圧力は p_0 で、全圧 p は次のように示される。

$$p = \left(1 + \frac{3}{2}\alpha\right)p_0$$

22

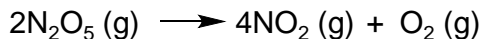
一定体積での気相分解反応：



で全圧が初期圧力の1.5倍に増加したとき、反応はどの程度進んだか？

23

一定体積での気相分解反応：



で全圧が初期圧力の1.5倍に増加したとき、反応はどの程度進んだか？

$$\left(1 + \frac{3}{2}\alpha\right) = 1.5$$

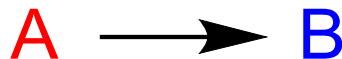
$$\alpha = \frac{1}{3}$$

24

反応速度を
どう表すか？

25

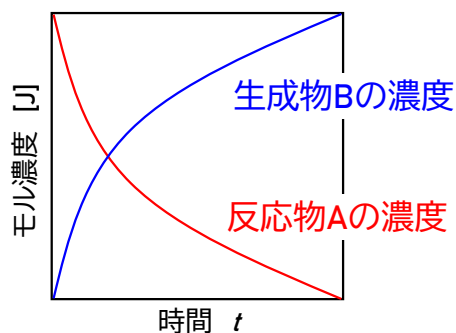
反応速度をどう表すか？



Aが消費される速さ
Bが生成する速さ

26

反応速度をどう表すか？



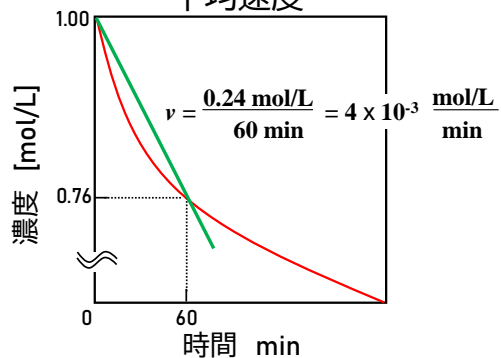
27

反応速度をどう表すか？

1 mol/LのAが1時間の反応の後に
0.24 mol/Lだけ減少したとする。

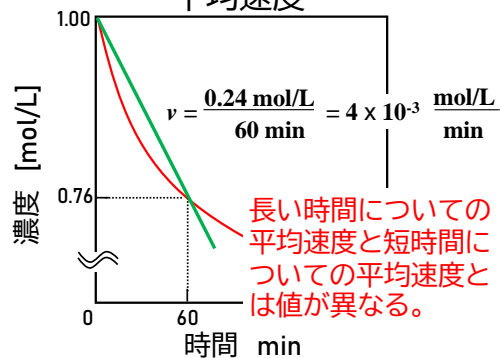
28

平均速度

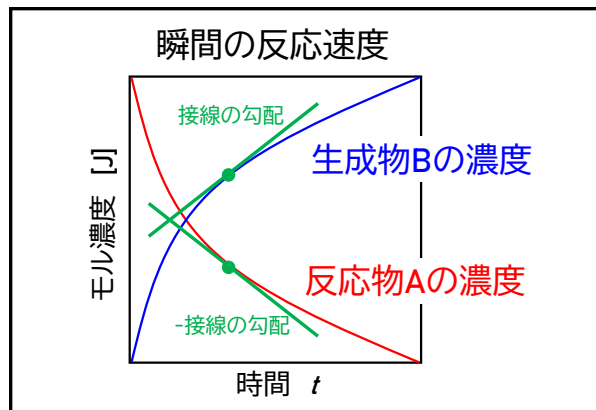


29

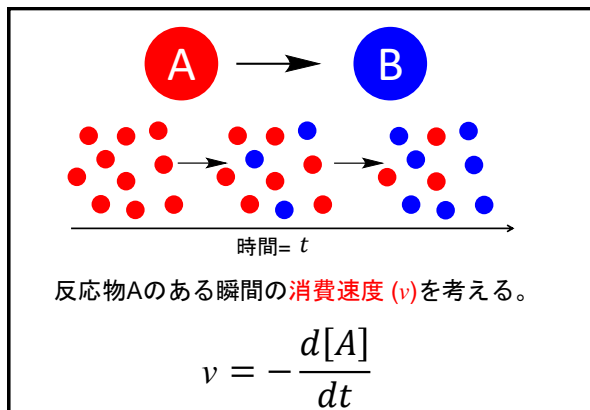
平均速度



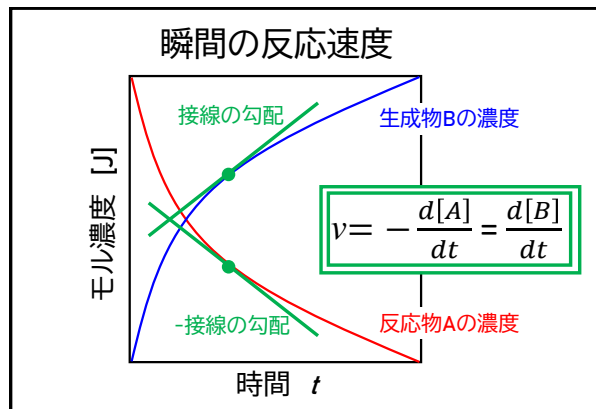
30



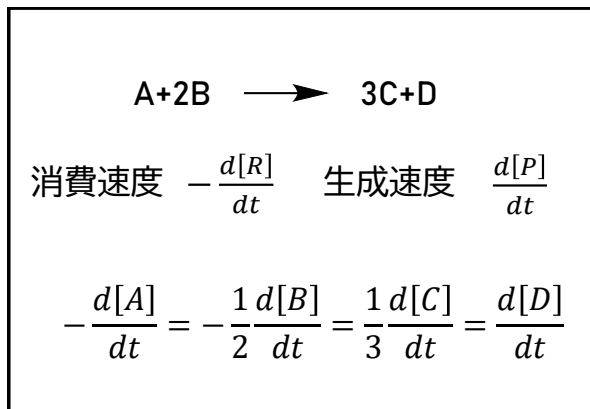
31



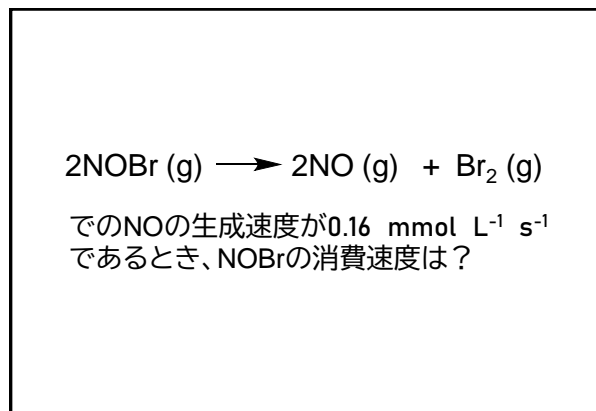
32



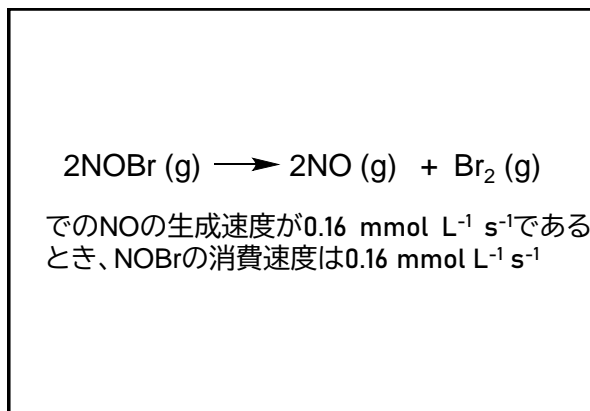
33



34



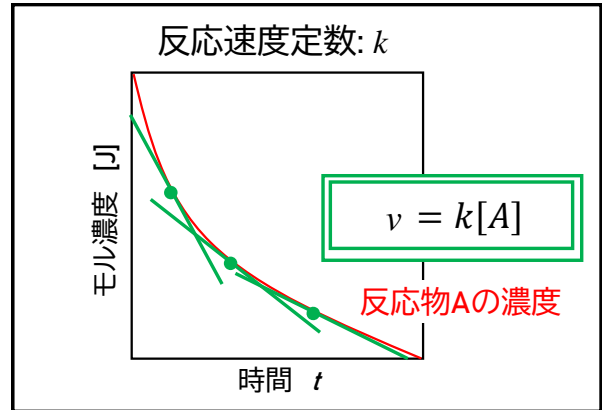
35



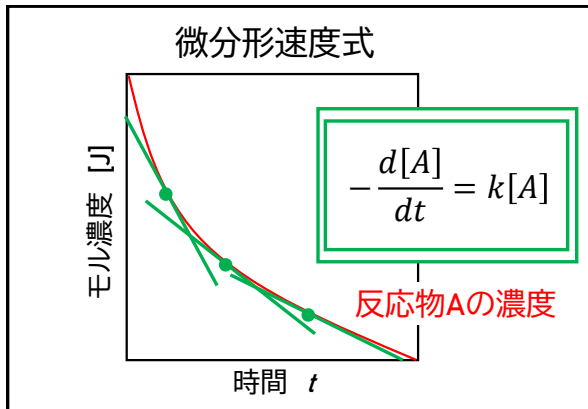
36

反応速度は濃度によって決まり、反応の進行とともに濃度が増えるために時間とともに変化する。

37

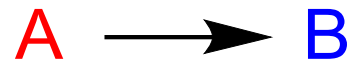


38

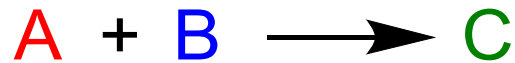


39

反応速度 (v) は反応物のモル濃度に比例



$$v = k[A]$$



$$v = k[A][B]$$

40

反応速度 (v) は反応物のモル濃度に比例

$$v = k[A]^a[B]^b[C]^c \dots$$

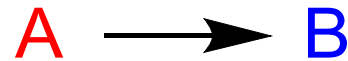
多くの反応での速度式

濃度のべき数 ($a, b, c \dots$) をその化学種に対する反応の次数という。

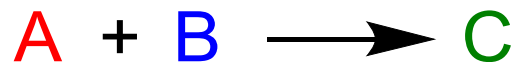
反応の全次数は、個々の次数の和 ($a+b+c+\dots$)

41

反応次数



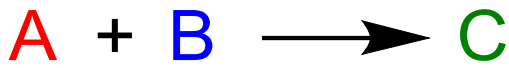
$$v = k[A] \quad \text{1次}$$



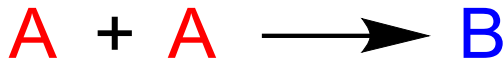
$$v = k[A][B] \quad \text{2次}$$

42

反応次数



$$v = k[A][B]$$

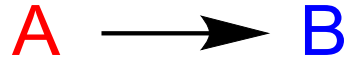


$$v = k[A][A] = k[A]^2$$

43

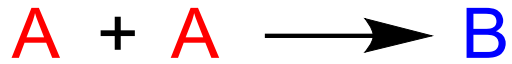
微分形速度式

1次



$$-\frac{d[A]}{dt} = k[A]$$

2次



$$-\frac{d[A]}{dt} = k[A]^2$$

44

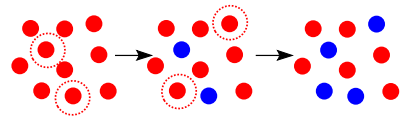
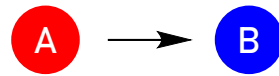
微分形速度式

 n 次

$$-\frac{d[A]}{dt} = k[A]^n$$

45

1次反応

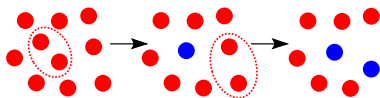


$$-\frac{d[A]}{dt} = k[A]$$

反応速度が一つの物質だけに比例する反応

46

2次反応

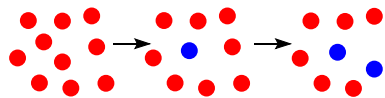
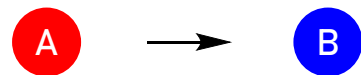


$$-\frac{d[A]}{dt} = k[A]^2$$

反応速度がふたつの物質の積に比例する反応

47

0次反応



$$-\frac{d[A]}{dt} = k[A]^0 = k$$

反応速度が反応物の濃度に依存しない反応

48

積分形速度式

積分形速度式は
反応速度の解析に役立つ

$$-\frac{d[A]}{dt} = k[A]$$



$$-\frac{d[A]}{dt} = k[A]^2$$

速度式は微分方程式
なので、濃度を時間
の関数として得よう
とするならば積分し
なければならない。