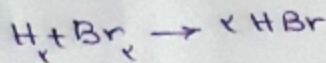


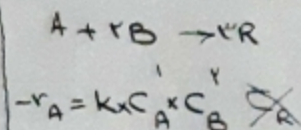
مثال ۱



$$r_{HBr} = \frac{k_1 [H_2] [Br_2]^{1/2}}{k_2 + \frac{[HBr]}{[Br_2]}}$$

$$\alpha A + \beta B \rightarrow \gamma R$$

$$\frac{-r_A}{\alpha} = \frac{-r_B}{\beta} = \frac{r_R}{\gamma}$$

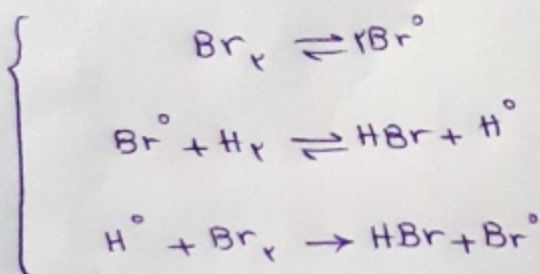


* توان این مورد بررسی :

- ۱- حضور ثابت سرعت ← همیشه این توان برقرار است
- ۲- حضور غلظت مایه مواد اولیه و عدم حضور غلظت محصولات ← در این مثال نقص شده
- ۳- بین همسایه اجزاء فقط و فقط ضرب وجود داشته باشد ← در این مثال نقص شده
- ۴- توان غلظت هر جزء در معادله سرعت = ضریب آن جزء در معادله واکنش ← در این مثال نقص شده

این واکنش غیر متغیر است

مکانیزم واکنش :

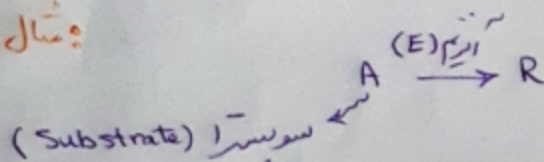


حد واسطه : $H^\bullet$ و $Br^\bullet$

نوع حد واسطه : رادیکال آزاد

نوع مکانیزم در تجربه این (به دلیل حضور مرحله استوار)

مثال ۲



آنزیم : Enzyme

$$r_R = \frac{k[A][E_0]}{[M] + [A]}$$

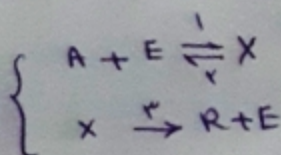
سرعت ثابت میانی - متغیر

- واکنش غیر متغیر

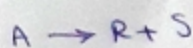
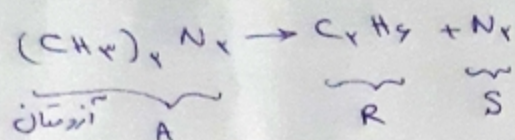
- حد واسطه : X (مولکول)

- مکانیزم غیر متغیر

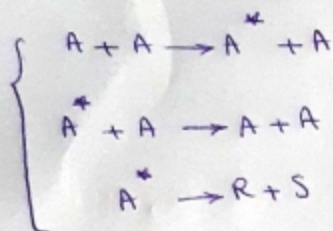
مکانیزم واکنش :



مثال ۳:



واکنش غیر متوازن

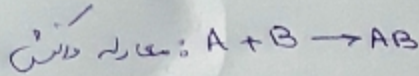


- حد واسطه: A^* (ترتیب برابری)

- مکانیزم؟

* بررسی مدل‌های سینتیکی *

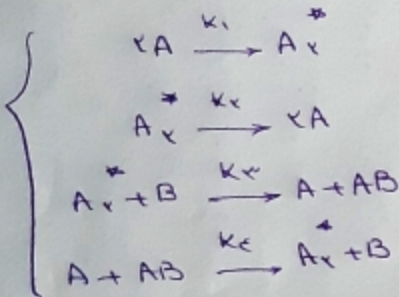
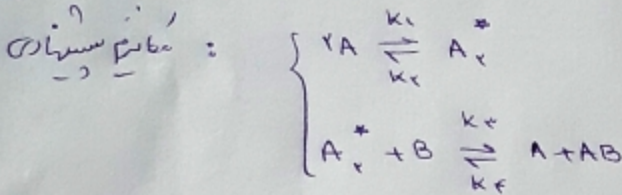
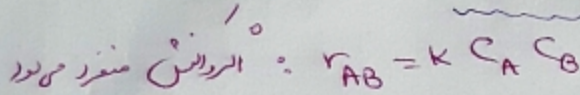
مثال ۱-۲



مقادیر سرعت: $r_{AB} = k C_B^2$

معادله واکنش را بسازید.

حل:



مرحله اول: پارادوکس مراحل معادله

مرحله دوم: نوشتن سرعت واکنش برای یک جرد مبنا، بر اساس معادله

$r_{AB} = \text{سرعت تولید در واکنش ۳} + \text{سرعت مصرف در واکنش ۴}$

سرعت تولید در واکنش ۳: $+ k_3 C_A^* C_B$

سرعت مصرف در واکنش ۴: $- k_4 C_A C_{AB}$

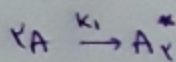
$$\Rightarrow r_{AB} = +k_3 C_A^* C_B + -k_4 C_A C_{AB} \quad (I)$$

مرحله سوم: نوشتن سرعت واکنش برای حدود شرط

$r_{A^*} = \text{سرعت تولید در ۱} + \text{سرعت مصرف در ۲} + \text{سرعت مصرف در ۳} + \text{سرعت تولید در ۴}$

$$= -k_1 C_A + k_2 C_A^* - k_3 C_A^* C_B + k_4 C_A C_{AB}$$

سرعت تولید A^* در ۱:



$r_A = -k_1 C_A$
 $\frac{-r_A}{2} = \frac{+r_{A^*}}{1}$

$$\Rightarrow \frac{-(-k_1 C_A)}{2} = \frac{r_{A^*}}{1}$$

$$\Rightarrow r_{A^*} = \frac{1}{2} k_1 C_A$$

مصرف

$$r_{A_r}^* = \frac{1}{V} K_1 C_A^r + \underbrace{-K_r C_{A_r}^*}_{\text{مردود}} + \underbrace{-K_r C_{A_r}^* C_B}_{\text{مردود}} + \underbrace{+K_r C_A C_{AB}}_{\text{مردود}} \quad \textcircled{\text{II}}$$

مرطبه چهارم: استفاده از فرض حالت پایا و برپایی تعادل در واسطه برای سادگی

$$\textcircled{\text{II}} = 0 \Rightarrow \frac{1}{V} K_1 C_A^r - \underbrace{K_r C_{A_r}^* - K_r C_{A_r}^* C_B}_{-C_{A_r}^* (K_r + K_r C_B)} + K_r C_A C_{AB} = 0$$

$$\frac{1}{V} K_1 C_A^r - C_{A_r}^* (K_r + K_r C_B) + K_r C_A C_{AB} = 0$$

$$\frac{1}{V} K_1 C_A^r + K_r C_A C_{AB} = C_{A_r}^* (K_r + K_r C_B)$$

$$C_{A_r}^* = \frac{\frac{1}{V} K_1 C_A^r + K_r C_A C_{AB}}{K_r + K_r C_B} \quad \textcircled{\text{III}}$$

مرطبه پنجم: جایگزینی درون رابطه تعادل در رابطه سرعت جرد مینا و انجام ساده سازی های ریاضیاتی

$\textcircled{\text{III}}$ in $\textcircled{\text{I}}$:

$$r_{AB} = K_r \times \left(\frac{\frac{1}{V} K_1 C_A^r + K_r C_A C_{AB}}{K_r + K_r C_B} \right) C_B - K_r C_A C_{AB}$$

$$r_{AB} = \frac{K_r C_B \times \frac{1}{V} K_1 C_A^r + K_r C_B K_r C_A C_{AB}}{K_r + K_r C_B} - \frac{K_r C_A C_{AB}}{1}$$

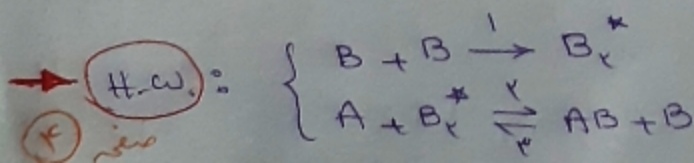
$$\Rightarrow r_{AB} = \frac{\frac{1}{V} K_1 K_r C_A^r C_B + \cancel{K_r K_r C_A C_B C_{AB}} - K_r K_r C_A C_{AB} - \cancel{K_r K_r C_A C_B C_{AB}}}{K_r + K_r C_B}$$

$$\Rightarrow r_{AB} = \frac{\frac{1}{V} K_1 K_r C_A^r C_B - K_r K_r C_A C_{AB}}{K_r + K_r C_B}$$

معادله سرعت حاصل از مقادیر
ساده شده

$$\text{اگر } K_1 = 0 \Rightarrow r_{AB} = \frac{-K_r K_r C_A C_{AB}}{K_r + K_r C_B}$$

مقادیر اشتباه است! $\times$



نکته: در مورد این مقادیر صحیح
و اشتباه است