

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ

ПОРТФОЛИО

Пәні:Катализ.

**Қ.А.ЯСАУИ АТЫНДАҒЫ ХАЛЫҚАРАЛЫҚ ҚАЗАҚ-ТҮРІК УНИВЕРСИТЕТІ,
ЖАРАТЫЛЫСТАНУ ФАКУЛЬТЕТІ, ЖХМ-511(Ғ) ТОБЫНЫҢ СТУДЕНТІ МӘЛКЕН Т.
А.**

Түркістан -2017

Сөз жоспары:



Катализ теориясы



Мультиплетті теория.



Құрылымдылық (геометриялық) сәйкестілік принципі



Катализдегі энергетикалық сәйкестілік принципі.



Пайдаланған әдебиеттер

SMART-МАҚСАТ

S

M

A

R

T

Интербелсенді тақтаны пайдалана отырып студенттерге А.А. Баландиннің мультиплеттік теориясы туралы түсіндіру, арқылы тыңдаушының интеллектуальды ой-өрісі мен дүниетанымын кеңейту және білім нәтижелерін бағалау.

Қазіргі кезде катализдің біртұтас және танымал теориясы жоқ. Әр уақытта түрлі елдердің зерттеушілері бір-бірін толықтыратын каталитикалық әсерге түрліше физико-химиялық негізделетін жеке теорияларын ұсынды.

Оларды екі топқа бөлуге болады:

1) катализатор қасиетіне физикалық, жеке алғанда адсорбционды негізделетін катализдегі бекітіліп, ие болатын теориялар;

2) каталитикалық әсердің мәніне химиялық тәсілмен негізделетін теориялар.

I- топқа адсорбцияның келесі түрлерімен болатын адсорбционды катализ теорияларын жатқызады:

- біртекті және әртекті бетке нүктелік (бір орталықты) адсорбциялау (И.

Лэнгмюр, Х.С.Тейлор, С. З.Рогинский, Я.Б.Зельдович, М.И.Темкин және т.б.);

- көп орталықты адсорбциясы (А.А.Баландиннің мультиплетті теориясы, геометриялық сәйкестілік принципі) және Н.И.Кобозевтің активті ансамбльдер теориясы.

II -группаға жатқызуға болады:

- аралық химиялық қосылыстың бұрынғы теориясы (Д.И.Менделеев, П.Сабатье, Н.Д.Зелинский, В.Н.Ипатьев);

- катализдің электрондық теориясы (Ф.Ф.Волькенштейн);

- А.А.Баландиннің энергетикалық сәйкестілік принципіндегі мультиплетті теориясы;

- Г.К.Боресковтың гетерогенді катализдегі қазіргі физико-химиялық теориясы (каталитикалық әсерді болжау теориясы).

Мультиплетті теория.

- Бұл теория катализатордың беткі қабатындағы активті бөлікте орналасқан атомдар мен молекула орналасуының әрекеттесуші реагент атомдары мен молекулаларының орналасуына сәйкес болуына негізделген. Бұл теория жалпы алғанда катализатордың тек молекуламен адсорбциялануын ғана емес, катализатордың беткі қабатындағы геометриялық тұрғыдан алғанда дұрыс орналасқан ион не атом, онын өзіне сәйкес орналасқан әрекеттесуші молекула құрамындағы ион не атом топтарымен әрекеттесуін де зерттейді. Катализатордың кристалды торындағы мультиплеттер деп аталатын кейбір жекеленген бөлшектерін катализатордың беткі қабатындағы активті орталық дейді және осы мультиплеттің құрылысы кристалды тордың құрылысына тәуелді, дұрыс геометриялық конфигурациялы болады. Мұндай мультиплетке адсорбцияланып “конған” молекуладағы ион не атом топтарының ара қашықтығы, осы мультиплеттегі арақашықтығы өзіне сәйкестеріне тоқталады. Осы тұста адсорбцияланған молекуладағы химиялық байланыс өзгереді. Мұның шамасы мультиплеттегі атомдардың ара қашықтығына байланысты: бұл қашықтық өскен сайын молекуладағы химиялық байланыс әлсіреп, үзілуге бейім болады. Сондай-ақ мұндай химиялық байланыстар берілген молекула құрамындағы атомдар мультиплеттегі әр түрлі атомдарға адсорбцияланады да, оңай үзіледі.

Мысалы, этил спиртінен сутектің бөлінуін, яғни сутексіздену (дегидрлеу) реакциясын алайық. Катализдегі мультиплетті теория бойынша бұл реакция катализатордың екі нүктесінде жанасып, онан әрі жүреді және мұны дублетте жүретін реакция дейді. Дублеттегі атомның біріне CH_2 және OH тобындағы екі сутек адсорбцияланса, екіншісіне осы екі топтағы көміртек пен оттектін, атомдары тартылады. Мұндай тартылыс нәтижесінде *көміртек — сутек және оттек-сутек* байланыстары үзіліп, *сутек — сутек және көміртек — оттек* жаңа байланыстары пайда болады да, сірке альдегиді мен сутек молекуласы түзіледі.

А.А. Баландиннің мультиплеттік теориясы

1927 ж. А.А.Баландин нафтендердің және гетероатомды циклды қосылыстардың каталитикалық гидрлеу реакциясы мысалында катализатор әсерінің ерекшелігін ойлап тапты.

А.А. Баландинге каталитикалық әсердің орныққан арнайы заңдылықтары катализатор мен реагирлеуші заттың бөліну шекарасындағы аралық әсерді шарттайтын механизмнің себебін табуға итермеледі.

1929ж. А.А. Баландин қалаған мультиплетті теорияның негізгі анықтамасы сипатталды:

- ❖ Адсорбционды және каталитикалық активті орталықтардың бірдей еместігі;
- ❖ Катализ байланыстардың қайта бөлінуіне және хемосорбцияның ерекше түріне негізделген физикалық және химиялық қарапайым процестерде комплекс түрінде болады. Молекулалар байланыстардың қайта бөлінуіне және әлсіретуге әкелетін бірнеше адсорбциялық орталықтарға адсорбцияланады;
- ❖ Молекуладағы реагирлеуші заттар катализатордың атомаралық қашықтығымен сәйкес келетін атомдардың бір-біріне жақын орналасқан ерекше топтары – «индексті топ» бойынша бөлінеді;
- ❖ Катализатордың активті орталықтары – екі немесе одан көп атомдардан тұратын «мультиплет» деп аталатын атомдар тобы (дублет, триплет, квадруплет, секстет). Мультиплеттің активтілігі катализатордың дұрыс кристалдық құрылымын көресететін қырлары, қабырғалары, бұрыштары, дөңестері және басқа да бөлімшелердің ерекшеліктерімен шартталған.
Гетерогенді каталитикалық процестер үшін қатты кристалдық катализатордың торына реагирлеуші заттың адсорбцияланған молекуласын бағдарлы салу арқылы дублетте, триплетте, квадруплетте және секстетте әсер етуі жиі жүзеге асады.

*А.А. Баландиннің
мультиметті
теориясы маңызды екі
принципке негізделген.*

*Құрылымдылық
(геометриялық)
сәйкестілік принципі;*

*Энергетикалық
сәйкестілік принципі.*

Құрылымдылық (геометриялық) сәйкестілік принципі

Құрылымдылық (геометриялық) сәйкестілік принципі катализатордың оңтайлы кристалдық құрылымының орындалуын қажеттілігіне негізделген. Процесс реагирлеуші молекуланың атомаралық қашықтық конфигурациясына сәйкес анықталатын катализатор торының параметрлері және берілген реакцияның кристалдық құрылымы болған кезде максималды жылдамдыққа жетеді. *Құрылымдық сәйкестілік принципі* мультиплеттегі катализатордың активті орталықтарын және реагирлеуші заттағы атомдар арасындағы индексті топты түзетін валентті бұрыш тұрақтылығын орындалуын талап етеді. Органикалық заттың молекуласындағы валентті бұрыштың ауытқуын болдыратын кез келген қосымша кернеу шайырлы сынықтардың түзілуіндегі байланыстың қопсытылуын емес, бұзылуына әкелуі мүмкін.

Катализдегі энергетикалық сәйкестілік принципі.

- Берілген реакция үшін катализатор мен реагирлеуші заттың байланыс энергиялары қатаң түрде анықталған максималды жылдамдығы бар каталитикалық реакция жүрсе энергетикалық сәйкестілік қосылады. Катализатор бетіндегі және реакциянды фаза көлеміндегі өзгеруші молекуладағы атом аралық байланыс энергиясы әр түрлі болады. Мультиплетті комплекстің түзілу (E^*) және ыдырау (E^{**}) энергиялары келесі теңде бойынша бейнелеуге болады:

•

$$E^* = -Q_{AB} - Q_{CD} + (Q_{AKt} + Q_{BKt} + Q_{CKt} + Q_{DKt}) \quad (1)$$

$$E^{**} = Q_{AC} + Q_{BD} - (Q_{AKt} + Q_{BKt} + Q_{CKt} + Q_{DKt}) \quad (2)$$

Пайдаланған әдебиеттер

- <https://referattar.kazaksha.info/катализ-теориясы>
- <http://studopedya.ru/1-84173.html>
- <https://wikiplanet.click/enciclopedia/катализ-теориялары>
- <https://baribar.kz/student/4425/geterogendi-kataliz-teoriyalary-zhane/>
- http://psu.kz/arm/upload/umk_pdf/24318.pdf