

## **Пересмотр уравнения Аррениуса в химической кинетике для анализа данных кинетики фотохромных нафтоксазин-спироиндолинов**

**Джонатан Хобли**

*OndaLabs R & D Consultancy, Deca Homes, Кларк Фри-Порт, Барангай Марго, Анджелес, 2009, Филиппины*

### **АННОТАЦИЯ**

В бакалавриате кинетика и термодинамика часто преподаются как отдельные модули. Это потому, что данные равновесия в области термодинамики не дают нам информацию о скорости достижения равновесия, то есть кинетики. Верно, что даже если химическая реакция термодинамически приемлема, она может никогда не произойти из-за кинетических соображений. Однако такое разделение кинетики и термодинамики в некоторых отношениях вызывает сожаление. В этой работе исследуется связь между химической кинетикой и термодинамикой, основанная на том, что оба они определены одной диаграммой потенциальной энергии. Распространенное заблуждение, вызванное курсами бакалавриата по химической кинетике, заключается в утверждении, что уравнение Аррениуса является неполноценным, поскольку оно не дает точного значения для предэкспоненциального термина  $A$ . Курсы бакалавриата часто продолжают предлагать более сложные теории в форме теории столкновения и теории переходного состояния, приводящих к уравнению Эйринга. Эти две последние теории необходимы для того, чтобы формально показать, что предэкспоненциальный член содержит информацию о требованиях реакции к энтропии. В этой работе будет показано, что, рассматривая связь между термодинамикой и кинетикой, легко можно показать, что термин  $A$  уже неявно связан с продуктом энтропии активации реакции и собственной частотой реакции. Эта работа использует ранее опубликованные и неопубликованные результаты по

фотохромным нафтоксазин-спиро-индолинам для сравнения различных теорий.

*Ключевые слова:* уравнение Аррениуса, теория переходных состояний, теория столкновений, нафтоксазин-спиро-индолин, фотохромное, химическая кинетика.