

Kimyəvi kinetikanın fenomenoloji kinetikasının müasir vəziyyəti**Cavadova Samirə Nəsim qızı** ORCID 0009-0008-1270-1724*Sumqayıt Dövlət Universiteti, Sumqayıt, Azərbaycan, müəllim*
samira.cavadova@sdu.edu.az

MƏQALƏ HAQQINDA MƏLUMAT	XÜLASƏ
Məqalənin tarixçəsi Daxilolma tarixi: 20.11.2025 Düzəliş tarixi: 28.01.2026 Qəbul olunma tarixi: 24.02.2026	Məqalədə kimyəvi kinetikanın mühüm sahələrindən biri olan fenomenoloji kinetikanın elmi əsasları, müasir inkişaf istiqamətləri və tətbiq sahələri təhlil edilir. Fenomenoloji kinetika kimyəvi reaksiyaların sürətinin empirik və yarım-nəzəri üsullarla izahını verərək, reaksiyaların mexanizminin dərin elmi təhlilinə imkan yaradır. Müasir dövrdə hesablama kimyası, molekulyar modelləşdirmə və kvant kinetik yanaşmalar fenomenoloji kinetikanın inkişafına yeni impuls vermişdir. Məqalədə həm klassik, həm də müasir yanaşmalar müqayisəli şəkildə araşdırılmış, bu istiqamətin gələcək tədqiqat imkanları qiymətləndirilmişdir
Açar sözlər kimyəvi kinetika, fenomenoloji kinetika, reaksiya sürəti, aktivləşmə enerjisi, modelləşdirmə, kinetik tənliliklər	

Kimyəvi kinetika maddələrin çevrilmə proseslərinin zamanla necə baş verdiyini öyrənən elmin mühüm sahəsidir [1]. Bu elm sahəsi kimyəvi reaksiyaların mexanizmini, sürətini və onlara təsir edən amilləri araşdırır. Fenomenoloji kinetika isə bu ümumi istiqamətin empirik və yarım-nəzəri tərəfini təşkil edir; o, kimyəvi reaksiyaların sürət qanunlarının və kinetik sabitlərin təcrübi yolla müəyyən olunmasına əsaslanır [3].

Müasir kimya elminin inkişafı ilə əlaqədar olaraq fenomenoloji kinetika yalnız sadə reaksiyaları deyil, həm də çoxkomponentli, zəncirvari və katalitik reaksiyaları izah etmək üçün geniş imkanlar açır [5]. Fenomenoloji kinetikanın məqsədi kimyəvi reaksiyaların sürətini və mexanizmini riyazi və təcrübi şəkildə ifadə etməkdir [1]. Əsas anlayışlar - reaksiya sürəti, reaksiya tərtibi, sürət sabiti və aktivləşmə enerjisidir.

Reaksiya sürəti tənliyi ümumi şəkildə aşağıdakı kimi ifadə olunur:

$$v = k [A]^m [B]^n.$$

Burada k - sürət sabiti, $[A]$, $[B]$ - reagentlərin qatılığı, m və n isə reaksiya tərtibləridir. Arrenius tənliyi ($k = z_0 e^{-E_a/RT}$) kimyəvi kinetikanın fenomenoloji əsasını təşkil edir [1,3]. Bu tənlilik temperaturun reaksiyanın sürətinə təsirini izah edir və aktivləşmə enerjisini təyin etməyə imkan yaradır [2].

Fenomenoloji kinetika sənaye kimyasında, katalitik sistemlərin optimallaşdırılmasında və ekokimyəvi proseslərin proqnozlaşdırılmasında geniş tətbiq tapır [4,5]. Məsələn, ammoniyakın sintezində, neftin krekinqi proseslərində və polimerləşmə reaksiyalarında fenomenoloji modellər istehsalın səmərəliliyini artırmaq üçün mühüm rol oynayır [2]. Həmçinin, biokimyəvi reaksiyalarda fermentativ sistemlərin kinetikasi fenomenoloji üsullarla öyrənilərək, Michaelis-Menten modeli kimi tanınmış tənliliklər əldə olunmuşdur [3].

Son onilliklərdə fenomenoloji kinetikanın inkişafına iki əsas istiqamət təsir göstərmişdir:

1. Hesablama kimyası və modelləşdirmə - molekulyar səviyyədə reaksiyaların dinamikasını kompüter simulyasiyaları ilə izləməyə imkan yaradır [2,5].
2. Qeyri-xətti kinetika və xaos sistemlər - mürəkkəb reaksiya mexanizmlərinin öz-özünə təşkili və dinamik sabitlik məsələlərini izah edir [3].

Müasir tədqiqatlarda kinetik sabitlərin eksperimental təyini ilə yanaşı, kvant-kimyəvi üsullarla nəzəri hesablanması geniş yayılmışdır [1,2]. Bu, fenomenoloji kinetikanın yalnız empirik deyil, həm də fundamental əsaslara söykənən bir elm sahəsinə çevrilməsinə gətirib çıxarmışdır.

Fenomenoloji yanaşma sayəsində kimyəvi reaksiyaların idarə edilməsi və optimallaşdırılması mümkün olur [4]. Müxtəlif amillərin - təzyiq, temperatur, katalizator səthi və reagentin qatılığının - təsiri eksperimental modellərlə dəqiqliklə öyrənilə bilər [1,5].

Bu üsullar sənaye istehsalında enerjiyə qənaət, məhsuldarlığın artırılması və ekoloji təsirlərin azaldılması baxımından böyük əhəmiyyət daşıyır [3].

Fenomenoloji kinetikanın gələcək tədqiqat istiqamətləri aşağıdakı məsələlərə yönəlmişdir:

- Nanoölçülü sistemlərdə kinetik proseslərin modelləşdirilməsi [2];
- Süni intellekt və maşın öyrənməsi metodları ilə sürət sabitlərinin proqnozlaşdırılması [5];
- Biokimyəvi və farmasevtik reaksiyaların çoxparametrlili kinetik təhlili [3].

Bu istiqamətlər fenomenoloji kinetikanın həm fundamental, həm də tətbiqi kimya sahəsində rolunu daha da gücləndirəcəkdir.

Hesablama kimyası, yəni **computational chemistry**, kimyəvi reaksiyaların molekulyar səviyyədə təhlilinə imkan verən sahədir. Bu yanaşma eksperimental üsullarla müəyyən etmək çətin olan sürətli və mürəkkəb prosesləri riyazi modellər və simulyasiyalar vasitəsilə öyrənməyə imkan verir. Fenomenoloji kinetikada hesablama kimyası bir neçə əsas istiqamətdə tətbiq olunur:

- **Molekulyar dinamika simulyasiyaları (MDS):** Bu metod reagentlərin, məhsulların və keçid vəziyyətlərinin atom və molekulyar səviyyədə hərəkətini izləməyə imkan verir. Simulyasiyalar sayəsində reaksiyaların mexanizmi, zəncirvari proseslərin sürətinə təsir edən amillər və enerji profilini dəqiqliklə öyrənmək mümkündür.
- **Kvant kimyəvi hesablama:** Kvant mexanikasına əsaslanan metodlar (məsələn, DFT - Density Functional Theory, ab initio üsulları) molekulların elektron strukturlarını təhlil edərək, aktivləşmə enerjisi, reaksiya potensial enerjisi səthlərini və keçid komplekslərinin xüsusiyyətlərini müəyyən edir. Bu, fenomenoloji kinetik modellərdə istifadə olunan sürət sabitlərinin daha dəqiq proqnozlaşdırılmasına şərait yaradır.
- **Kinetik modellərin proqnozlaşdırılması:** Hesablama kimyası ilə birləşdirilmiş simulyasiyalar mürəkkəb reaksiyaların dinamikasını öncədən proqnozlaşdırmağa imkan verir. Bu yanaşma eksperimental kinetik məlumatlarla müqayisədə daha sürətli nəticələr verir və yeni katalizatorlar, reagent qarışıqları və şəraitlər üçün optimallaşdırılmış modellər hazırlamağa kömək edir.
- **Mürəkkəb sistemlərin təhlili:** Nanoölçülü sistemlər, biokimyəvi fermentativ reaksiyalar və çoxkomponentli sənaye prosesləri üçün hesablama kimyası olmadan mexanizmləri anlamaq çətinidir. Simulyasiyalar reaksiyaların molekulyar səviyyədə necə baş verdiyini göstərərək, fenomenoloji tənliklərin daha dəqiq və ümumiləşdirilmiş şəkildə qurulmasına imkan verir.

Hesablama kimyası və modelləşdirmə fenomenoloji kinetikanın müasir inkişafında əvəzsiz alət rolunu oynayır. O, yalnız təcrübi nəticələri dəstəkləmir, həm də reaksiyaların mexanizminin dərin izahını verir, yeni tədqiqat istiqamətlərini açır və kinetik modellərin proqnozlaşdırma dəqiqliyini artırır.

Qeyri-xətti kinetika və xaotik sistemlər kimyada və fizika sahəsində mürəkkəb reaksiya və prosesləri anlamağa kömək edir. Burada əsas məqam "qeyri-xəttilik" və "xaos" anlayışlarıdır.

1. Qeyri-xətti kinetika

- Klassik (xətti) kinetikada, reaksiya sürəti sadə xətti asılılıqlarla verilir: məsələn, bir reagentin qatılığı ilə düz mütənəsbidir.
- Qeyri-xətti kinetikada isə reaksiya sürəti bir və ya bir neçə reaktantın qatılığının müxtəlif qüvvətləri və ya kombinasiyaları ilə bağlı olur. Nəticədə reaksiya nəticələri birbaşa xətti proqnozlaşdırıla bilmir. Kiçik dəyişikliklər böyük fərqlərə səbəb ola bilər.

2. Xaotik sistemlər

- Xaos buradakı “tam təsadüfi” mənasında deyil, müəyyən qaydalara əməl edən, amma uzunmüddətli davranışı öncədən çətin proqnozlaşdırılan sistemlər deməkdir. Məsələn, bəzi kimyəvi reaksiyalar öz-özünə davranış ritmini dəyişir, dövrü və ya çox kompleks nümunələr göstərir. Bu sistemlərdə kiçik başlanğıc fərqləri (məsələn, temperatur və ya qatılıq fərqləri) reaksiyanın gedişatında böyük dəyişikliklər yarada bilər.
- Öz-özünə təşkil: mürəkkəb reaksiyalar zamanla müəyyən müntəzəm strukturlar və nümunələr yarada bilər. Məsələn, Belousov-Zhabotinsky reaksiyasında (B-Z reaksiyası) rəng dəyişiklikləri müəyyən dövrilik göstərir.
- Dinamik sabitlik: sistem daim dəyişir, amma müəyyən sabit nümunələr və ya balanslar saxlayır. Yəni, sistem tam xaos deyil, müəyyən tərtibatla hərəkət edir.

Qısa misal: B-Z reaksiyası: kimyəvi “oscillating reaction” (osillasiya edən reaksiya) kimi tanınır. Rəngi dəyişir, lakin bu dəyişikliklərin xüsusi qaydası və ritmi var. Burada həm qeyri-xətti kinetika, həm də xaos davranış görünür.

Kimyəvi kinetikanın fenomenoloji istiqaməti müasir elmin mühüm və dinamik inkişaf edən sahələrindən biridir [1]. O, reaksiyaların mexanizmlərini anlamağa, onların sürətini proqnozlaşdırmağa və praktiki tətbiqləri optimallaşdırmağa imkan verir [3]. Müasir hesablama metodları, riyazi modellər və eksperimental texnologiyalar fenomenoloji kinetikanın imkanlarını xeyli genişləndirmişdir [2,5].

Gələcək tədqiqatlar getdikcə aşağıdakı istiqamlərə yönələcək:

- Nanomiqyaslı sistemlərin kinetik modelləşdirilməsi [2];
- Sürət sabitlərini proqnozlaşdırmaq üçün süni intellekt və maşın öyrənməsinin tətbiqi [5];
- Biokimyəvi və əczaçılıq proseslərində çoxdəyişkənli kinetik analiz [3].

Bu istiqamətlər empirik kimya ilə nəzəri molekulyar elm arasında körpü kimi fenomenoloji kinetikanın daha da güclənməsinə töhfə verəcəkdir.

Ədəbiyyat

- [1]. Laidler, K. J. Chemical Kinetics // Harper & Row, –New York, –1987.
- [2]. Atkins, P., Physical Chemistry / P. Atkins, J. de Paula –Oxford University Press, –2018.
- [3]. House, J. E. Principles of Chemical Kinetics // Academic Press, –2007.
- [4]. Espenson, J. H. Chemical Kinetics and Reaction Mechanisms // McGraw-Hill, –2002.
- [5]. Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası. Kimyəvi proseslərin kinetikasi üzrə müasir tədqiqatlar, –Bakı, –2022.

Summary

The modern state of phenomenological kinetics of chemical kinetics

Cavadova S.N.

Keywords: chemical kinetics, phenomenological kinetics, reaction rate, activation energy, modeling, kinetic equations

This article analyzes the scientific foundations of phenomenological kinetics, one of the important areas of chemical kinetics, its modern development directions and application areas. Phenomenological kinetics provides an explanation of the rate of chemical reactions by empirical and semi-theoretical methods, allowing for a deep scientific analysis of the mechanism of reactions. In modern times, computational chemistry, molecular modeling and quantum kinetic approaches have given new impetus to the development of phenomenological kinetics. The article comparatively examines both classical and modern approaches, and evaluates the future research opportunities of this direction.

Резюме

Современное состояние феноменологической кинетики химической кинетики

Джавадова С.Н.

Ключевые слова: химическая кинетика, феноменологическая кинетика, скорость реакции, энергия активации, моделирование, кинетические уравнения.

В данной статье анализируются научные основы феноменологической кинетики, одного из важных направлений химической кинетики, ее современные направления развития и области применения. Феноменологическая кинетика дает объяснение скорости химических реакций эмпирическими и полутеоретическими методами, что позволяет проводить глубокий научный анализ механизма реакций. В настоящее время вычислительная химия, молекулярное моделирование и квантово-кинетиические подходы дали новый импульс развитию феноменологической кинетики. В статье проводится сравнительное исследование как классических, так и современных подходов, а также оцениваются будущие исследовательские возможности этого направления.