

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический факультет
Кафедра общей химии и хроматографии

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе
_____ В.П. Гарькин
« ____ » _____ 2006 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ. КИНЕТИКА

(блок Общепрофессиональных дисциплин; раздел «Федеральный компонент»; основная образовательная программа специальности 020101 Химия)

Самара
2006

Рабочая программа составлена на основании Государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования специальности 020101 (011000)

Химия, утвержденного 10.03.00. (номер государственной регистрации 127 ен/сп) и типовой (примерной) программы дисциплины «Физическая химия», одобренной Научно-методическим Советом по химии УМО университетов 29.04.2002.

Составитель рабочей программы д.х.н., проф. Буланова А.В.

Рецензент д.х.н., проф. Курбатова С.В.

Рабочая программа утверждена на заседании кафедры общей химии и хроматографии (протокол № 1 от «1» сентября 2006 г.)

Заведующий кафедрой

Проф., д. х. н.

" ____ " _____ 2006 г.

Л.А. Онучак

СОГЛАСОВАНО

Декан

факультета

" 29 " 09 2006 г. _____ С.В. Курбатова

СОГЛАСОВАНО

Начальник

методического отдела

" 29 " 09 2006 г. _____ Н.В. Соловова

ОДОБРЕНО

Председатель

методической

комиссии факультета

" 28 " 09 2006 г. _____ И.В. Лобачева

1. Цели и задачи дисциплины, ее место в учебном процессе, требования к уровню освоения содержания дисциплины

1.1. Цели и задачи изучения дисциплины

Цель дисциплины – изучение фундаментальных знаний химической кинетики как науки о скоростях и механизмах химических реакций, основных экспериментальных закономерностях, лежащих в основе теории химической кинетики, общих законах химической кинетики, связи теории химической кинетики с современными технологиями, применяемыми в химической, нефтехимической, газовой промышленности, а также формирование у студентов знаний и умений в решении практических вопросов в области химической кинетики, умение использовать теоретические подходы при разработке новых технологий, а также самостоятельно ставить эксперимент по изучению кинетических характеристик различных систем и уметь проводить численные расчеты кинетических параметров.

Задачи дисциплины:

–раскрыть роль химической кинетики в природных и промышленных процессах, сформулировать основные задачи теории химической кинетики, установить область применения химической кинетики, описать ее структурные элементы и понятия;

–рассмотреть основные экспериментальные методы химической кинетики, принцип построения теории химической кинетики на их основе, структуру и математические формы основных уравнений химической кинетики, особенности их использования при описании основных законов химической кинетики;

–рассмотреть основные методы экспериментального и теоретического исследования в химической кинетике, использования законов химической кинетики в современных технологиях;

–проанализировать основные принципы моделирования химических процессов с использованием теорий химической кинетики, установить область применения этих моделей, рассмотреть способы вычисления кинетических параметров, характеризующих химические явления.

1.2. Требования к уровню подготовки студента, завершившего изучение данной дисциплины

Студенты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

Иметь представление:

–о границах применимости классических законов химической кинетики;
–о принципах, лежащих в основе теорий фундаментальных взаимодействий;

–о принципах использования законов химической кинетики в современных технологиях.

Знать:

–базовую терминологию, относящуюся к химической кинетике, основные понятия, законы химической кинетики и их математическое выражение;

–фундаментальные опыты, лежащие в основе химической кинетики;

–логику построения теорий химической кинетики на основе фундаментальных опытов;

–основные методы кинетического исследования .

Уметь:

–продемонстрировать связь фундаментальных опытов с теориями химической кинетики с помощью известных математических методов;

–решать задачи по данной дисциплине;

–моделировать электромагнитные явления и проводить численные расчеты соответствующих физических величин в общепринятых системах единиц;

–проводить эксперименты по измерению кинетических параметров с использованием простых методов обработки результатов измерения.

1.3. Связь с предшествующими дисциплинами

Для усвоения курса по химической кинетике требуется владение теорией пределов, операциями дифференцирования (в том числе частными производными), интегрирования (в том числе интегрированием по поверхности и объему), методами решения простых обыкновенных дифференциальных уравнений.

Студент должен владеть основными методами и представлениями статистической термодинамики, квантовой химии, классической физики (раздел теплота, ядерные превращения), классической термодинамики (основные термодинамические характеристики), коллоидной химии (раздел теории адсорбции), вычисление средних значений физико-химических величин).

1.4. Связь с последующими дисциплинами

Понятия, законы и методы, введенные в курсе химической кинетики, будут использоваться в курсах электрохимии, химической технологии, высокомолекулярных соединений, органической химии, дисциплинах специализации на всех специализациях химического факультета. Методы измерений кинетических параметров будут использоваться в лабораториях химических практикумов и лабораториях специализаций.

2. Содержание дисциплины

2.1. Объем дисциплины и виды учебной работы (в часах)

ОЧНАЯ ФОРМА ОБУЧЕНИЯ, 6-й семестр – экзамен

Вид учебных занятий	Количество часов
<i>Всего часов аудиторных занятий</i>	<i>80</i>
Лекции	30
Практические занятия (семинары)	10
Лабораторные занятия	40
<i>Всего часов самостоятельной работы</i>	<i>100</i>
Подготовка к лекционным и практическим занятиям	40
Самостоятельная работа на практикуме	30
Подготовка к экзамену	30
<i>Всего часов по дисциплине</i>	<i>180</i>

2.2. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Количество часов		
		лекции	практические занятия	лабораторные занятия
1.	Введение	2		
2.	Основные понятия и законы химической кинетики	8	4	40
3.	Кинетический анализ простых и сложных реакций	20		
4.	Цепные реакции	6	2	
5.	Теории химической кинетики	34	2	
6.	Фотохимические реакции	4	2	
7.	Катализ	6		
8.	<i>Итого</i>	<i>80</i>	<i>10</i>	<i>40</i>

2.3. Лекционный курс

ТЕМА 1. ВВЕДЕНИЕ

Химическая кинетика - наука о скоростях и механизмах химических реакций. Несоответствие механизмов реакций и их стехиометрических уравнений. Механизм разложения N_2O , N_2O_5 , синтеза HBr и HI .

ТЕМА 2. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ЗАКОНЫ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

Основные понятия и законы химической кинетики. Определение скорости химической реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Определение константы скорости и порядка реакции. Реакции переменного порядка и изменение порядка в ходе реакции на примере реакции образования HBr . Молекулярность элементарных реакций.

Кинетический закон действия масс и область его применимости. Составление кинетических уравнений для известного механизма реакции. Прямая и обратная задачи химической кинетики. Зависимость константы скорости от температуры. Уравнение Арениуса. “Эффективная” и “истинная” энергии активации.

ТЕМА 3. КИНЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПРОСТЫХ И СЛОЖНЫХ РЕАКЦИЙ.

Необратимые реакции первого, второго и третьего порядков. Определение констант скорости из опытных данных. Методы определения порядка реакции и вида кинетического уравнения.

Сложные реакции. Принцип независимости элементарных стадий. Методы составления кинетических уравнений. Обратимые реакции первого порядка. Определение элементарных констант из опытных данных. Параллельные реакции. Последовательные реакции на примере двух необратимых реакций первого порядка. Кинетические кривые накопления отдельных продуктов.

Кинетический анализ процессов, протекающих через образование промежуточных продуктов. Принцип квазистационарности Боденштейна и область его применимости.

ТЕМА 4. ЦЕПНЫЕ РЕАКЦИИ

Элементарные процессы возникновения, продолжения, разветвления и обрыва цепей. Длина цепи. Различные методы расчета скорости неразветвленных цепных реакций. Применение метода стационарности для составления кинетических уравнений неразветвленных цепных реакций на примере темнового образования HBr.

Разветвленные цепные реакции. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях на примере реакции окисления водорода. Полуостров воспламенения. Период индукции. Зависимость скорости реакции на нижнем пределе воспламенения от диаметра сосуда и природы его поверхности. Применение метода квазистационарных концентраций для описания предельных явлений в окрестностях первого и второго пределов воспламенения. Тепловой взрыв и условия воспламенения на третьем пределе.

ТЕМА 5. ТЕОРИИ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

Теория соударений. Упругие, неупругие, химические соударения. Общее число столкновений. Множитель Больцмана. Число активных столкновений. Стерический фактор. Теоретический расчет константы скорости бимолекулярной реакции. Применение теории соударений к бимолекулярным реакциям. Теория соударений в применении к мономолекулярным реакциям. Схема Линдемана и ее сопоставление с опытными данными. Причины неточности схемы Линдемана. *Поправки Хиншельвуда и Касселя. Понятие о теории РРКМ.*

Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Поверхность потенциальной энергии для взаимодействия трех атомов водорода. Сопоставление результатов приближенных и точных расчетов поверхности потенциальной энергии для этой системы.

Теория переходного состояния (активированного комплекса). Свойства активированного комплекса. Статистический расчет константы скорости. Основные допущения теории активированного комплекса и область его применимости. Трансмиссионный коэффициент.

Термодинамический аспект теории активированного комплекса. Энтропия активации. Соотношения между опытной и истинной энергией активации. Объяснение “повышенных” и “заниженных” значений предэкспоненциального множителя.

Бимолекулярные реакции. Теория активированного комплекса в применении к бимолекулярным реакциям различного типа. Теория соударений в применении к бимолекулярным реакциям. Сопоставление результатов теории соударений и теории активированного комплекса.

Тримолекулярные реакции. Применение теории активированного комплекса для описания тримолекулярных реакций с участием оксида азота. Теория соударений в применении к тримолекулярным реакциям. Сопоставление результатов обеих теорий.

ТЕМА 6. ФОТОХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ

Элементарные фотохимические процессы. Фотохимические активные частицы. Эксимеры, эксиплексы и их свойства. Изменение физических и химических свойств молекул при электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон фотохимической эквивалентности Эйнштейна. Определение кинетических постоянных фотохимических реакций методом стационарных концентраций.

ТЕМА 7. КАТАЛИЗ

Определение катализа. Общие принципы катализа. Роль катализа в химии. Основные промышленные каталитические процессы. Примеры механизмов каталитических процессов.

Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ. Классификация реакций кислотно-основного типа. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета и их использование для вычисления скорости реакции и кинетических постоянных. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Бренстеда и его использование в кинетике каталитических реакций. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций. Уравнение Семенова в кинетике радикальных реакций. Специфический и общий основной катализ, нуклеофильный и электрофильный катализ.

Катализ комплексными соединениями переходных металлов. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы. Каталитическое окисление этилена комплексными соединениями палладия.

Ферментативный катализ. Общие сведения о кинетике и механизмах ферментативных реакций. Применение принципа стационарности для вычисления начальной скорости гомогенной каталитической реакции с участием одного реагента. Уравнение Михаэлиса — Ментэн. Определение кинетических постоянных этого уравнения из опытных данных.

Гетерогенный анализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность. Явление отравления катализаторов. Активность и селективность катализаторов. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций. Энергия активации каталитических реакций. Неоднородность поверхности катализаторов. Нанесенные катализаторы.

Металлы как катализаторы. Теория мультиплетов Баландина. Принцип геометрического и энергитического соответствия. Область применения теории мультиплетов. Нанесенные катализаторы. Теория активных ансамблей Кобозева.

2.4. Практические (семинарские) занятия

№ п/п	Но-мер темы	Коли-чество часов	Тема практического занятия
1	2	2	Основные понятия и законы химической кинетики Кинетический анализ простых и сложных реакций
2	3		
3	4	2	Цепные реакции. Контрольная работа
4	5	2	Теории химической кинетики
5	6	2	Фотохимические реакции
6	7	2	Катализ. Контрольная работа

2.5. Лабораторный практикум

№ п/п	Раздел дисциплины	№ разде-ла	Коли-чество часов	Наименование лабораторных работ
1.	Кинетический анализ простых и сложных ре-акций	3	6	Изучение скорости инверсии тростникового сахара.
2.	Кинетический анализ простых и сложных ре-акций	3	6	Изучение скорости иодирования ацетона

3.	Основные понятия и законы химической кинетики Кинетический анализ простых и сложных реакций	2,3,4	6	Коллоквиум
4.	Кинетический анализ простых и сложных реакций	3	6	Изучение реакции омыления эфира и определение энергии активации
5.	Кинетический анализ простых и сложных реакций	3	6	Изучение кинетики разложения комплексного иона триоксалата марганца
6.	Теории химической кинетики Фотохимические реакции Катализ. Контрольная работа	5,6,7	6	Коллоквиум

3. Организация текущего и промежуточного контроля знаний

3.1. Контрольные работы

Тематика контрольных работ	Сроки проведения	Темы дисциплины
Основные понятия и законы химической кинетики. Кинетический анализ простых и сложных реакций.	2-е практическое занятие,	2,3,4
Теории химической кинетики. Фотохимические реакции. Катализ.	5-е практическое занятие	5,6,7

3.2. Комплекты тестовых заданий

- Комплект тестовых заданий для оценивания знаний студентов, полученных ранее и необходимых для усвоения курса. Тестирование проводится на 1 неделе занятий.

- Комплект тестовых заданий по темам курса. Тестирование проводится на 4, 9, 14, 16 практических занятиях.

3.3. Самостоятельная работа

3.3.1. Поддержка самостоятельной работы (сборники тестов, задач, упражнений и др.)

1. Задачи по физической химии с решениями. Методические рекомендации для студентов специальности химия. Изд-во «Самарский университет». 1999. 52 с.

3.3.2. Тематика рефератов

Написание рефератов по курсу не предусмотрено.

3.4. Курсовая работа, её характеристика ; примерная тематика

Курсовая работа по курсу не предусмотрена.

Итоговый контроль проводится в виде зачета и экзамена в 6 семестре. Зачет ставится на основании выполнения и отчёта по лабораторным работам, результатам тестирования, ответам и выступлениям на практических занятиях, результатам контрольных работ. Экзаменационная оценка ставится на основании письменного и устного ответов по экзаменационному билету.

4. Технические средства обучения и контроля, использование ЭВМ

- Компьютерный класс, используемый при проведении лабораторного практикума и практических занятий.

5. Активные методы обучения (деловые игры, научные проекты)

- Выполнение лабораторных работ в общем практикуме с элементами исследования.
- Решение задач исследовательского характера на практических занятиях.

6. Материальное обеспечение дисциплины

Оборудование для выполнения работ лабораторного практикума по химической кинетике:

1. Кондуктометры.
2. Поляриметры
3. Химические реагенты
4. Фотоэлектроколориметры

7. Литература

7.1. Основная *(одновременно изучают дисциплину 75 человек).*

1.Эммануэль Н.Н., Кноре Д.Г. Курс химической кинетики. М.: Высшая школа. 1974.

2.Физическая химия. Под ред. Краснова К.С. Т.2 М.: Высшая школа. 1995.

3.Лабовиц Л., Аренс Дж. Задачи по физической химии с решениями. М.: Мир. 1972.

7.2. Дополнительная

1. Даниэльс Ф., Олберти Р. Физическая химия. М.: Мир, 1978г.

2. Курс физической химии. Т.І и Т.ІІ. Под ред. Я.И. Герасимова. М.: Химия, 1973.

7.3. Учебно-методическая

1. Байрамов В.М. Химическая кинетика и катализ : Примеры и задачи с решениями: Учебное пособие для вузов.-М.:Академия,2003.-320с.