

**АННОТАЦИИ ПРОГРАММ УЧЕБНЫХ ДИСЦИПЛИН
подготовки бакалавра по направлению 020101.62 Химия**

ЦИКЛ ДИСЦИПЛИНЫ НАПРАВЛЕНИЯ

Федеральный компонент:

Физическая химия (Кинетика)

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.

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.

Краткое содержание

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 .

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.

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.

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.

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

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.

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. 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.

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.

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

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.

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.

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.

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 энергетического соответствия. Область применения теории мультиплетов. Нанесенные катализаторы. Теория активных ансамблей Кобозева.