

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



Программа дисциплины
Кинетика химических реакций СЗ.В.3

Специальность: 020201.65 - Фундаментальная и прикладная химия

Специализация: Физическая химия

Квалификация выпускника: специалист

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Киселев В.Д.

Рецензент(ы):

Варфоломеев М.А.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Соломонов Б. Н.

Протокол заседания кафедры No ____ от "____" _____ 201__г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от "____" _____ 201__г

Регистрационный No 73613

Казань
2014

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Киселев В.Д. Кафедра физической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова, Vladimir.Kiselev@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

- 1) Понимание студентами-химиками основ и количественных соотношений, определяющих степень завершения химического процесса;
- 2) Выяснение основных факторов, влияющих на скорость протекания химических процессов;
- 3) Представление о возможных осложнениях протекания основного процесса и побочных реакций.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел "С3.В.3 Профессиональный" основной образовательной программы 020201.65 Фундаментальная и прикладная химия и относится к вариативной части. Осваивается на 4 курсе, 8 семестр.

Дисциплина "Кинетика химических реакций" входит в вариативную часть профессионального цикла С 3. и включает в себя основы высшей математики, физики, химии, катализа и термодинамики. Освоение основ химической кинетики требует от студента базовых знаний в области высшей математики (дифференцирование, интегрирование), в области неорганической, аналитической и органической химии, общей физики и наличие базового опыта для проведения экспериментальных работ.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-6 (профессиональные компетенции)	владеет навыками работы на современной учебно-научной аппаратуре при проведении химических экспериментов
ПК-7 (профессиональные компетенции)	имеет опыт работы на серийной аппаратуре, применяемой в аналитических и физико-химических исследованиях
ПК-8 (профессиональные компетенции)	владеет методами регистрации и обработки результатов химически экспериментов

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

Основные приемы для количественного описания скорости процесса, степени расхода реагентов и образования целевого продукта. Владеть теоретическими основами основных положений кинетики химических реакций для решения технологических и производственных вопросов, а также для определения фундаментальных величин - энтальпии, энтропии, свободной энергии активации из зависимости скорости от температуры, а также объема активации и объема реакции из зависимости свободной энергии от давления.

2. должен уметь:

Самостоятельно проводить необходимые расчеты в области химической кинетики, опираясь на справочную литературу, определять основные параметры протекания реакций.

3. должен владеть:

Основными приемами мониторинга за ходом химических реакций, практическими навыками проведения кинетических измерений и расчетов всех кинетических параметров активации и реакции с привлечением современного оборудования и программного обеспечения.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

Основные приемы для количественного описания скорости процесса, степени расхода реагентов и образования целевого продукта. Владеть теоретическими основами основных положений кинетики химических реакций для решения технологических и производственных вопросов, а также для определения фундаментальных величин - энтальпии, энтропии, свободной энергии активации из зависимости скорости от температуры, а также объема активации и объема реакции из зависимости свободной энергии от давления.

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных(ые) единиц(ы) 108 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 8 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Основы химической кинетики	8	1-4	8	0	8	отчет
2.	Тема 2. Влияние на скорость реакции температуры, растворителя, катализатора	8	5-8	8	0	8	отчет
3.	Тема 3. Влияние высокого гидростатического давления на скорость химической реакции.	8	9-12	8	0	8	контрольная работа отчет
4.	Тема 4. Определение объемов активации реакции	8	13-15	6	0	10	отчет
	Тема . Итоговая форма контроля	8		0	0	0	зачет
	Итого			30	0	34	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Основы химической кинетики

лекционное занятие (8 часа(ов)):

Введение. Предмет "Кинетика химических реакций". Краткий исторический очерк. Значение для развития теории и практики химических процессов. Основы химической кинетики. Количественное описание скорости элементарных неравновесных процессов. Приемы мониторинга за ходом реакции в газовой фазе и в растворе. Приемы определения порядка реакции. Приемы пересчета констант скорости для разных концентрационных и временных шкал. Обратимые, параллельные и равновесные процессы. Применение ПК для проведения расчетов констант скорости и их достоверности.

лабораторная работа (8 часа(ов)):

Очистка реагентов методом кристаллизации и хроматографии на колонке. Очистка растворителей. Порядок работы на спектрофотометре "Unico-2800".

Тема 2. Влияние на скорость реакции температуры, растворителя, катализатора

лекционное занятие (8 часа(ов)):

Влияние на скорость реакции температуры, растворителя, катализатора. Термодинамическая вероятность и кинетическая возможность протекания реакции. Влияние температуры. Возможности и ограничения. Примеры отрицательного влияния температуры на наблюдаемую скорость реакции. Важность данных об энтальпии и энтропии активации для фундаментальной и прикладной химии. Особенности влияния среды. Виды взаимодействия. Постоянные и переменные вклады энергий взаимодействия в ходе реакции и их влияние на изменение скорости реакции. Термодинамическое разрешение для протекания реакции как основа для поиска катализаторов процесса. Основные причины повышения активности реагентов в присутствии катализаторов.

лабораторная работа (8 часа(ов)):

Порядок подключения прецизионного термостата. Температурный контроль. Калибровка термоблока с кварцевыми кюветами. Проверка спектральной чистоты реагента по конечному поглощению в реакции циклоприсоединения.

Тема 3. Влияние высокого гидростатического давления на скорость химической реакции.

лекционное занятие (8 часа(ов)):

Влияние высокого гидростатического давления. Теория переходного состояния об энергии активации и объеме активации. Производные свободной энергии по температуре и по давлению. Шкалы среднего, высокого и сверхвысокого гидростатического давления. Что происходит с реакционной системой под давлением? Сжимаемость и расширение. Баланс энергий притяжения и отталкивания. Изотермические коэффициенты сжимаемости, изобарические коэффициенты расширения, изохорный температурный коэффициент давления. Кажущийся и парциальный мольный объем. Понятие об электрострикции. Энергия межмолекулярного взаимодействия и объемные изменения при сольватации. Изменение скорости и равновесия в условиях высокого гидростатического давления. Изменение свойств среды при сканировании температуры или давления.

лабораторная работа (8 часа(ов)):

Проверка выполнения закона Бугера-Ламберта-Бера. Проведение реакции в ацетонитриле при 20, 30 и 40 град.С. Проведение реакции в толуоле при 20, 30 и 40 град.С. Расчет констант скорости в каждом растворителе.

Тема 4. Определение объемов активации реакции

лекционное занятие (6 часа(ов)):

Определение объемов активации и реакции. Методы и приемы определения величин объемов активации и объемов реакции. Важность объемных параметров для фундаментальной и прикладной химии. Показательные примеры реализации реакций лишь при высоком давлении. Понятия о лабораторных и промышленных установках высокого давления в РФ и за рубежом. Возможность проверки выполнения термодинамических и кинетических соотношений

лабораторная работа (10 часа(ов)):

Расчет энергии активации, энтальпии, энтропии и свободной энергии активации для каждой реакции. Возможные объяснения различий в скорости и в параметрах активации.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Основы химической кинетики	8	1-4	подготовка к отчету	14	отчет
2.	Тема 2. Влияние на скорость реакции температуры, растворителя, катализатора	8	5-8	подготовка к отчету	8	отчет
3.	Тема 3. Влияние высокого гидростатического давления на скорость химической реакции.	8	9-12	подготовка к контрольной работе	4	контрольная работа
				подготовка к отчету	10	отчет
4.	Тема 4. Определение объемов активации реакции	8	13-15	подготовка к отчету	8	отчет
	Итого				44	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

- компьютерные презентации лекций,
- компьютерная обработка результатов лабораторного практикума,
- разбор контрольных работ.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Основы химической кинетики

отчет , примерные вопросы:

Представление письменного отчета по работам: Очистка реагентов методом кристаллизации и хроматографии на колонке. Очистка растворителей. Порядок работы на спектрофотометре "Unico-2800". Порядок подключения прецизионного термостата. Температурный контроль. Калибровка термоблока с кварцевыми кюветами.

Тема 2. Влияние на скорость реакции температуры, растворителя, катализатора

отчет , примерные вопросы:

Представление письменного отчета по работам: Проверка спектральной чистоты реагента по конечному поглощению в реакции циклоприсоединения. Проверка выполнения закона Бугера-Ламберта-Бера. Проведение реакции в ацетонитриле при 20, 30 и 40 град.С.

Тема 3. Влияние высокого гидростатического давления на скорость химической реакции.

контрольная работа , примерные вопросы:

1. Размерность и примерные численные значения Z (общее число столкновений). 2. Какую молекулярную модель используют при выводе общего числа столкновений? 3. Поясните термины "эффективный диаметр" и "эффективное сечение столкновений". 4. Зависит ли эффективный диаметр от температуры? 5. Поясните термин "активная молекула". 6. Какие гипотезы лежат в основе теории активных столкновений? 7. Что такое стерический фактор P (физический смысл в ТАС)? 8. Как связаны между собой величины экспериментальной энергии активации и энергии, входящей в уравнение ТАС ($E_{\text{эксп}}$ и E_a)? 9. Каковы основные достоинства и недостатки ТАС? 10. Знание каких свойств молекул необходимо для расчета числа столкновений (Z)? 11. Проблемы мономолекулярных реакций (ТАС). 12. Основные положения теории Линдемана. 13. Основное отличие теорий Хиншельвуда, Касселя и Слейтера от теории Линдемана. 14. Какое предположение легло в основу "ТПС"? 15. Какие хим. реакции получили название "адиабатических"?

отчет, примерные вопросы:

Представление письменного отчета по работам: Проведение реакции в толуоле при 20, 30 и 40 град.С. Расчет констант скорости в каждом растворителе

Тема 4. Определение объемов активации реакции

отчет, примерные вопросы:

Расчет энергии активации, энтальпии, энтропии и свободной энергии активации для каждой реакции. Возможные объяснения различий в скорости и в параметрах активации.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Очистка реагентов методом кристаллизации и хроматографии на колонке. Очистка растворителей. Порядок работы на спектрофотометре "Unico-2800". Порядок подключения прецизионного термостата. Температурный контроль. Калибровка термоблока с кварцевыми кюветами. Проверка спектральной чистоты реагента по конечному поглощению в реакции циклоприсоединения. Проверка выполнения закона Бугера-Ламберта-Бера. Проведение реакции в ацетонитриле при 20, 30 и 40 град.С. Проведение реакции в толуоле при 20, 30 и 40 град.С. Расчет констант скорости в каждом растворителе. Расчет энергии активации, энтальпии, энтропии и свободной энергии активации для каждой реакции. Возможные объяснения различий в скорости и в параметрах активации.

Самостоятельная работа студентов (СРС) включает следующие виды:

- изучение теоретического лекционного материала;
- проработка теоретического материала (конспекты лекций, основная и дополнительная литература),
- оформление результатов лабораторного практикума.

7.1. Основная литература:

1. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия - М.: Высшая школа, 2003.
2. Методические разработки к практикуму по физической химии./Химическая кинетика/. Казань.КФУ. 2012 - 36с.

7.2. Дополнительная литература:

1. High pressure techniques in chemistry and physics. Eds. W. B. Holzapfel and N. Isaacs. Oxford University Press, 1997.
2. High pressure chemistry. Eds. R.van Eldik, F.-G. Klärner. Wiley-VCH, Weinheim, 2002.
3. И.А. Семиохин, Б.В. Страхов, А.И. Осипов. Кинетика гомогенных химических реакций. Москва, МГУ, 1986.
4. Гоникберг М.Г. Химическое равновесие и скорость реакций при высоких давлениях, Москва, Химия, 1969.

5. Герасимов Я.И. и др. Курс физической химии. - М.: Химия, 1963 (Т. 1), 1966 (Т. 2).
6. Еремин Е.Н. Основы химической кинетики. - М.: Высшая школа, 1976.
7. Киреев В.А. Курс физической химии. - М.: Химия, 1975.

7.3. Интернет-ресурсы:

Химический факультет МГУ. - <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/phys.html>

А. Березовчук Физическая химия: конспект лекций. - http://www.ph4s.ru/book_him_phys.html

Пособия по физической химии. - http://www.fptl.ru/Y4eba_Fizhimija.html

Форум химиков. - <http://forum.xumuk.ru/index.php?showtopic=49605>

Электронная библиотека - www.rushim.ru

Электронные ресурсы Химического института КФУ. - http://www.kpfu.ru/main_page?p_sub=12946

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Кинетика химических реакций" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Оборудование:

1. Баростат "БК-1" с термоконтролем до 250 С и давлением до 10 кбар.
2. Спектрофотометр "UNICO 2800", однолучевой, с программным управлением.
3. Спектрофотометр "Hitachi U-3000", двухлучевой, с программным управлением..
4. Плотномер "DMA-602, прецизионный.
5. Плотномер "DSA-5000" для измерения плотности и сжимаемости.
6. Спектрофотометр (SCINCO) в комплексе с модулем высокого давления (до 6 кбар) для кинетических измерений под давлением.
7. Прецизионные термостаты типа "VT-14-01".
8. Весы электронные: точностью до 10 мг; до 1 мг; до 0.1 мг и до 0.01 мг.

Компьютерные комплексы

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по специальности: 020201.65 "Фундаментальная и прикладная химия" и специализации Физическая химия .

Автор(ы):

Киселев В.Д. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Варфоломеев М.А. _____

"__" _____ 201__ г.