

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



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины
Кинетика химических реакций Б3.В.5

Направление подготовки: 020100.62 - Химия

Профиль подготовки: Физическая химия

Квалификация выпускника: бакалавр

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 № ____ от "____" ____ 201____г

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

Протокол заседания УМК № ____ от "____" ____ 201____г

Регистрационный № 727014

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 " Б3.В.5 Профессиональный" основной образовательной программы 020100.62 Химия и относится к вариативной части. Осваивается на 4 курсе, 8 семестр.

Дисциплина "Кинетика химических реакций" входит в вариативную часть профессионального цикла Б 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 - энталпии, 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 - энталпии, 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	отчет контрольная работа
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 энталпии 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. Каждый 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, энталпии, 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:

Вопросы к контрольной работе: 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 (Еэксп и Еа)? 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, энタルпии, 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:

Самостоятельная работа студентов (СРС) включает следующие виды:

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

ВОПРОСЫ К ЗАЧЕТУ:

1. Чем определяется эффект давления на скорость и равновесие процесса в растворе?
2. Дать определение параметрам "объем активации" и "объем реакции".
3. Какими способами можно определить значения объема реакции и объема активации?
4. Что такое изотермический коэффициент сжимаемости жидкости. Как он определяется и как изменяется с давлением и с температурой?
5. Что такое изобарический коэффициент расширения жидкости. Как он определяется и как изменяется с давлением и с температурой?
6. Что такое температурный коэффициент давления жидкости. Как он определяется. Понятие внутреннего давления жидкости и его оценка. Связь между коэффициентами сжимаемости, расширения и температурным коэффициентом давления.
7. Как влияет давление и температура на изменение объема, показателя преломления, на диэлектрическую проницаемость и вязкость жидкости.
8. Парциальный мольный объем вещества в растворе. Понятие электрострикции растворителя при сolvатации.
9. Как рассчитать энталпию реакции по данным об энталпии образования (в газовой фазе, в стандартном состоянии, в растворе)?
10. Как рассчитать изменение энталпии сolvатации реагентов, межмолекулярных комплексов, переходного состояния реакции и продуктов реакции?

7.1. Основная литература:

1. Соломонов, Б.Н. Методические разработки к практикуму по физической химии: для студентов химического факультета: [учебно-методическое пособие / Б. Н. Соломонов, В. Б. Новиков, М. А. Варфоломеев]; Казан. (Приволж.) федер. ун-т, Каф. физ. химии.?Казань: [Казанский университет], 2012.?; 21.Ч. 2: Химическая кинетика.?2012.?36 с.
2. Методические разработки к практикуму по физической химии [Текст: электронный ресурс]: для студентов химического факультета / Казан. гос. ун-т им. В.И. Ульянова-Ленина; [науч. ред. д.х.н., доц. Б.Н. Соломонов].?Б.м.: Б.и., Б.г.Ч. 2: Химическая кинетика [Текст: электронный ресурс] / [сост.: Л. З. Манапова, В. Б. Новиков].?Электронные данные (1 файл: 0,56 Мб).?Загл. с экрана.?Режим доступа: открытый .Химическая кинетика / [сост.: Л. З. Манапова, В. Б. Новиков].?Б.м., 2006 . ? <URL:<http://libweb.ksu.ru/ebooks/publicat/0-756998.pdf>>.
3. Афанасьев Б.Н. Физическая химия: учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по направлениям "Химическая технология", "Биотехнология" и "Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии" / Б. Н. Афанасьев, Ю. П. Акулова. Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 2012. - 463 с.
4. Чоркендорф, И. Современный катализ и химическая кинетика / И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт; пер. с англ. В. И. Ролдугина.?2-е изд..?Долгопрудный: Интеллект, 2013.?500 с.
5. Буданов В.В., Ломова Т.Н. Химическая кинетика: учебное пособие. [Электронный ресурс]. - Санкт-Петербург: Лань, 2014. - 288 с.
Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=42196
6. Афанасьев Б.Н. Акулова Ю.П. Физическая химия. [Электронный ресурс]. - Санкт-Петербург.: Лань, 2012. - 416 с. Режим доступа:
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=4312

7.2. Дополнительная литература:

1. Физическая химия : Учеб. для вузов: В 2кн. Кн.2. Электрохимия. Химическая кинетика и катализ / ; Краснов К.С., Воробьев Н.К., Годнев И.Н. и др.; Под ред. К.С.Краснова .? 3-е изд., испр. ? М. : Высшая школа, 2001 .? 319с
2. Байрамов В.М. Основы химической кинетики и катализа: Учебное пособие для вузов (под ред. В.В. Лунина). - М.: ИЦ Академия, 2003. - 256 с.
3. Байрамов, В.М. Химическая кинетика и катализ : примеры и задачи с решениями : учеб. пособие для студентов хим. фак. ун-тов, обучающихся по спец. 011000 "Химия" и направлению 510500 "Химия" / В. М. Байрамов .? М. : Академия, 2003 .? 316,

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 "ВК-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 направлению 020100.62 "Химия" и профилю подготовки Физическая химия .

Автор(ы):

Киселев В.Д. _____
"___" 201 ___ г.

Рецензент(ы):

Варфоломеев М.А. _____
"___" 201 ___ г.