

Аннотация

рабочей программы учебной дисциплины «Равновесие и кинетика реакций в растворах»

Направление подготовки: 04.04.01. «Химии» (уровень магистратуры)

профиль «Физическая химия»

Составитель аннотации к.п.н., профессор Саламов А.М.

Кафедра химии

Цель изучения дисциплины	Целью изучения дисциплины «Равновесие и кинетика реакций в растворах» является изучение современных представлений о структуре жидкостей и растворов, с учетом последних достижений в технике эксперимента по химической кинетике
Место дисциплины в структуре ОПОП магистратуры	Дисциплина «Равновесие и кинетика реакций в растворах» относится к альтернативным дисциплинам. Для ее изучения необходимы базовые знания неорганической химии, органической химии, физической химии, а также физики и математики.
Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины	В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования: - способен применять современные коммуникационные технологии, в том числе на иностранном языке, для академического и профессионального взаимодействия (УК-4); - способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работы выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках (ПК-3).
Содержание дисциплины	Введение. Состояние молекул растворенного вещества. Жидкое состояние вещества. Простая молекулярная модель жидкости. Энергия межмолекулярного взаимодействия. Основы химической термодинамики. Статистическая оценка констант равновесия. Кинетическое рассмотрение равновесных состояний.

Экспериментальные данные по равновесиям различного типа. Конформационные равновесия. Равновесие в процессах димеризации. Водородная связь. Дополнительные данные о водородной связи. Гидролитические равновесия. Рассмотрение равновесий на основе активностей и межмолекулярных сил. Влияние растворителя на химические равновесия. Равновесие процессов растворения. Равновесия между газами и водными растворами.

Основы химической кинетики. Порядок реакции. Порядок реакции и молекулярность. Механизм реакции. Метод стационарных концентраций. Уравнение Аррениуса. Теории химической кинетики. Энтропия активации мономолекулярных реакций. Энтропия активации бимолекулярных реакций. Кинетика и равновесие некоторых простых систем.

Диффузионные реакции. Частота столкновений между незаряженными сферическими частицами растворенного вещества. Уравнение Смолуховского. Кинетика растворения. Лимитирующая роль диффузии в химических реакциях. Уравнение Стокса-Эйнштейна. Кинетика коагуляции. Диффузия в реальных растворах. Диффузия в бинарных смесях. Столкновение между молекулами растворенного вещества и молекулами растворителя.

Кинетика некоторых простых реакций. Необратимые мономолекулярные реакции. Обратимые мономолекулярные реакции. Время релаксации в обратимых мономолекулярных реакциях. Последовательные мономолекулярные реакции. Необратимые бимолекулярные реакции. Кинетика омыления сложных эфиров. Конкурентные мономолекулярные и бимолекулярные реакции. Обратимые бимолекулярные и мономолекулярные реакции. Необратимые тримолекулярные реакции. Обратимые тримолекулярные и бимолекулярные реакции. Реакции переменного порядка. Каталитические реакции.

Ионные реакции. Уравнение Бренстеда-Бьеррума и его экспериментальная проверка. Значение сольволиза при ионных реакциях. Качественное описание роли ионных пар при ионных реакциях. Количественный подход к описанию участия ионных пар в ионных реакциях. Реакция между персульфатом калия и ферроцианидом калия. Кинетика уравнения Бренстеда-Бьеррума. Применение уравнения Бренстеда-Бьеррума к кинетике нитрования. Кинетика ионного замещения в октаэдрических комплексах.

Замещение при насыщенном атоме углерода. Реакции метилгалогенидов с иодид-ионами в ацетоне. Влияние разбавления в водных растворах. Реакции метилгалогенидов с цианид-ионами в водном растворе. Реакции метилгалогенидов с различными ионами в водных растворах. Реакции йодистого метила с различными ионами в водном

растворе. Значение сольватации.

Ионы и полярные молекулы; замещение в ароматическом ряду. Реакции в гомологическом ряду. Два механизма реакций замещения; карбониевые ионы. Влияние постоянного заряда на кинетику простых реакций в ароматическом ряду. Влияние заместителей на омыление алифатических сложных эфиров. Реакции между ионами и полярными молекулами в смешанных растворителях. Сопоставление реакций замещения в алифатическом и ароматическом рядах. Квантовомеханическая трактовка влияния орто-, мета- и пара-заместителей.

Мономолекулярные реакции. Разложение озона. Разложение пятиоксида азота в газовой фазе и в растворе. Простейшее выражение для константы скорости мономолекулярной реакции. Сопоставление мономолекулярных реакций в газовой фазе и в растворах. Кинетика реакций декарбоксилирования в растворе. Разложение иона фенилдиазония в воде. Разложение сильно полярных и солеобразных соединений. Общее статическое рассмотрение мономолекулярных реакций в газах. Мономолекулярные реакции, скорость которых определяется вращательной релаксацией.

Каталитические реакции. Некоторые простые каталитические реакции. Общий и специфический катализ. Катализ в растворе четыреххлористого углерода. Разложение дицетонного спирта; катализ гидроксид-ионами. Два механизма гидролиза, катализируемого ионами водорода. Гидролиз сложных эфиров в смешанных растворителях. Гомогенный катализ ионами металлов.

Влияние давления. Реакции в неводных средах. Объемный эффект активации и его зависимость от температуры. Объемный эффект активации при различных давлениях. Реакции в водных растворах. Ионные реакции. Реакции между ионами и полярными молекулами. Энтальпия и энергия активации.

Быстрые реакции и релаксационные эффекты. Определение скорости некоторых быстрых реакций классическими методами. Новые методы определения скоростей быстрых реакций. Релаксационные методы. Колебательная релаксация в жидкостях. Влияние давления на время релаксации. Релаксация, связанная с нарушением химического равновесия. Обратимые мономолекулярные реакции. Обратимая диссоциация. Димеризационные равновесия в разбавленных растворах. Изменение структуры жидкости. Релаксационные эффекты и медленные реакции. Кинетика колебательного возбуждения.

Корреляция. Статистические корреляции между параметрами растворимости. Статистические корреляции,

	<p>основанные на распределении энергии. Статистические корреляции для образования водородных связей, между константами диссоциации константами гидратации. Некоторые кинетические корреляции. Корреляция между статистическими и кинетическими постоянными. Уравнение Бренстеда.</p> <p>Реакции между полярными молекулами. Влияние растворителя: экспериментальные данные. Влияние диэлектрической проницаемости растворителя. Отклонения от строгой бимолекулярности. Предварительное обсуждение кинетики медленных реакций. Возможное объяснение медленности сольволитических реакций. Предварительное объяснение медленных реакций.</p>		
Знания, умения и навыки, получаемые в процессе изучения дисциплины	<p>В результате изучения дисциплины магистрант должен</p> <p>знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - простую молекулярную модель жидкости; - основы химической кинетики и механизм реакций; - кинетику некоторых простых реакций; - кинетику и равновесие некоторых простых систем. <p>уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - определять порядок реакции и молекулярность; - различать реакции между ионами и полярными молекулами, содержащие три полярные группы и в смешанных растворителях. <p>владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - основными методами кинетического исследования. 		
Объем дисциплины и виды учебной работы	Вид учебной работы	Всего часов	3 семестр
	Общая трудоемкость дисциплины	180	180
	Аудиторные занятия	64	64
	Лекции	32	32
	Практические занятия	32	32
	Самостоятельная работа	89	89

	Контроль	27	27	
Используемые ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Internet», информационные технологии, программные средства и информационно-справочные системы	<p>Программное обеспечение и Интернет-ресурсы</p> <p> http://fizrast.ru/sitemap.html http://www.don-agro.ru http://xn-80abucjiibhv9a.xn-plai/ http://www.agroxxi.ru/ (РГБ) http://elibrary.rsl.ru Научная электронная библиотека http://elibrary.ru/default.asp Российская национальная библиотека http://primo.nlr.ru http://nbmgu.ru Электронная библиотека Российской государственной библиотеки </p> <p>Материально-техническое обеспечение дисциплины</p> <ul style="list-style-type: none"> - лекционные аудитории; - аудитории для семинарских занятий; - проекционное оборудование и компьютер; - интерактивная доска. 			
Формы текущего и рубежного контроля	Тестовые задания, контрольные работы, коллоквиумы, курсовая работа.			
Формы промежуточного контроля	Экзамен			