

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Сибирский государственный аэрокосмический университет
имени академика М.Ф. Решетнева»
(СибГАУ)



УТВЕРЖДАЮ
Проректор по НИД

Ю.Ю. Логинов

2017 г.

ПРОГРАММА

ВСТУПИТЕЛЬНОГО ЭКЗАМЕНА ПО СПЕЦИАЛЬНОСТИ

Направление подготовки:	04.06.01	ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ
Профиль подготовки:	<i>шифр</i>	<i>наименование</i> ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ
Форма обучения:		<i>наименование</i> Очная, заочная
Квалификация выпускника	Исследователь. Преподаватель-исследователь.	
Кафедра-разработчик рабочей программы	Физической и аналитической химии	

Красноярск 2017

Физическая химия – раздел химической науки об общих законах, определяющих строение веществ, направление и скорость химических превращений при различных внешних условиях; о количественных соотношениях между химическим составом, структурой вещества и его свойствами.

Теоретической основой физической химии являются общие законы физической науки. Она включает учение о строении молекул вещества, химическую термодинамику и химическую кинетику.

Предмет химической кинетики. Молекулярность, порядок, скорость химической реакции. Влияние температуры на скорость реакции

Основные понятия химической кинетики. Определение скорости реакции. Кинетический закон действия масс и область его применимости. Кинетическая классификация химических реакций. Молекулярность и порядок реакции. Исследование вида кинетического уравнения. Причины непостоянства порядка реакции и несовпадение порядков при их определении различными методами. Кинетические кривые. Прямая и обратная задачи химической кинетики. Влияние температуры на скорость реакции. Уравнения Вант-Гоффа и Аррениуса.

Простые реакции первого, второго, третьего и нулевого порядков

Необратимые реакции нулевого, первого и второго порядков. Автокатализ. Необратимые реакции n -ного порядка. Определение констант скорости из опытных данных. Методы определения порядка реакции и вида кинетического уравнения. Время полупревращения и превращения на $1/r$ часть.

Кинетика сложных реакций. Обратимые, последовательные, параллельные и сопряженные химические реакции

Сложные реакции. Принцип независимости протекания элементарных стадий. Методы составления кинетических уравнений. Параллельные реакции. Последовательные реакции на примере двух необратимых реакций первого порядка. Метод квазистационарных концентраций Боденштейна-Семенова. Сопряженные реакции.

Теории химической кинетики

Теория активных столкновений реагирующих частиц. Допущения теории. Частотный множитель. Стерический фактор.

Теория активированного комплекса или переходного состояния. Реакционный центр активированного комплекса. Диаграмма поверхности потенциальной энергии реакции. Потенциальный барьер. Статистический расчет константы скорости. Выражение константы скорости реакции через термодинамические функции реагентов и активированного комплекса. Применение теории активированного комплекса.

Туннельный эффект. Кинетический изотопный эффект.

Реакции в открытых системах

Материальный обмен с окружающей средой. Удельная скорость подачи реагента. Типы проточных реакторов. Кинетика реакций в реакторах идеального вытеснения и идеального перемешивания.

Кинетика жидкофазных и твердофазных реакций

Диффузия молекул в жидкости. Теория столкновений в жидкости. Кинетическая, диффузионная и переходная область протекания реакции. Теория переходного состояния для реакций в жидкости. Клеточный эффект.

Особенности твердофазных реакций. Локализация реакционной зоны на поверхности раздела фаз твердого реагента и твердого продукта реакции. Топохимические реакции.

Влияние строения на скорость реакции

Влияние заместителей на реакционный центр. Электронные и стерические эффекты заместителей. Корреляционные соотношения в химической кинетике. Принцип линейности свободных энергий. Уравнения Тафта и Гаммета. Учет пространственного влияния. Корреляционные соотношения в химической кинетике. Компенсационный эффект.

Цепные реакции. Тепловой и цепной взрыв

Активные центры цепных реакций. Зарождение, развитие и обрыв цепей. Цепные неразветвленные реакции. Цепные разветвленные реакции. Горение и взрыв. Цепной взрыв (воспламенение). Верхний и нижний пределы воспламенения, их зависимость от температуры. Тепловой взрыв.

Катализ. Гомогенный катализ. Гетерогенный катализ. Теории катализа

Катализ, определение катализа. Общие принципы катализа. Роль катализа в химии. Основные промышленные каталитические процессы. Примеры механизмов каталитических процессов.

Слитный и отдельный механизм катализа. Каталитическая активность и селективность.

Гомогенный катализ. Кислотно-основный катализ. Классификация реакций кислотно-основного типа. Кинетика и механизм реакций специфического кислотно-основного катализа. Функции кислотности Гаммета и их использование для вычисления скорости реакции и кинетических постоянных. Уравнение Бренстеда и его использование в кинетике каталитических реакций. Окислительно-восстановительный катализ.

Автокатализ, ингибирование и периодические каталитические реакции

Гетерогенный катализ. Адсорбция как стадия гетерогенно-каталитических реакций. Изотерма адсорбции по Лэнгмюру. Диффузионная и кинетическая области катализа. Механизм гетерогенно-каталитических реакций. Макрокинетика гетерогенного катализа. Основные теории гетерогенного катализа.

Вопросы

1. Основные задачи химической кинетики.
2. Скорость химической реакции.
3. Закон действующих масс.
4. Кинетическая классификация химических реакций: молекулярность и порядок реакции.
5. Мономолекулярная реакция. Скорость мономолекулярной реакции.

6. Бимолекулярная реакция, ее скорость.
7. Тримолекулярная реакция, ее скорость.
8. Порядок реакции и его определение.
9. Влияние температуры на скорость реакции. Правило Вант-Гоффа.
10. Влияние температуры на скорость реакции. Уравнение Аррениуса.
11. Кинетическое уравнение реакции первого порядка.
12. Кинетическое уравнение реакции второго порядка.
13. Кинетическое уравнение реакции третьего порядка.
14. Реакции нулевого и n-ного порядка.
15. Обратимые реакции.
16. Параллельные реакции. Принцип независимости протекания химических реакций.
17. Последовательные (консекутивные) реакции.
18. Метод квазистационарных концентраций Боденштейна.
19. Метод лимитирующей стадии.
20. Сопряженные реакции.
21. Кинетика реакций в реакторе идеального перемешивания.
22. Кинетика реакций в реакторе идеального вытеснения.
23. Теория активных столкновений реагирующих частиц.
24. Теория активированного комплекса или переходного состояния.
25. Статистический расчет константы скорости реакции.
26. Применение теории активированного комплекса.
27. Мономолекулярные реакции. Механизмы реакций.
28. Бимолекулярные реакции. Классификация по типам распределения продуктов.
29. Особенности реакций в жидкой фазе.
30. Теория переходного состояния для реакций в жидкости.
31. Клеточный эффект.
32. Бимолекулярные реакции полярных частиц.
33. Ионные реакции.
34. Особенности твердофазных реакций.
35. Электронное влияние заместителей на скорость реакции.
36. Стерическое влияние заместителей на скорость реакции.
37. Влияние заместителей на скорость реакции. Уравнения Гаммета и Тафта.
38. Учет пространственного влияния заместителей.
39. Компенсационный кинетический эффект.
40. Цепные реакции.
41. Цепные неразветвленные реакции.
42. Цепные разветвленные реакции.
43. Горение и взрыв.
44. Фотохимические реакции. Законы фотохимии.
45. Каталитические реакции. Слитный и отдельный механизм катализа.
46. Каталитическая активность и селективность.
47. Кислотно-основный катализ.
48. Окислительно-восстановительный катализ.
49. Автокатализ, ингибирование и периодические каталитические реакции.
50. Гетерогенный катализ. Адсорбционная теория катализа.
51. Механизм гетерогенно-каталитических реакций.

52. Мультиплетная теория гетерогенного катализа.
53. Теория активных ансамблей гетерогенного катализа.
54. Электронная теория катализа.

Рекомендуемая литература

1. Стромберг, А.Г. Физическая химия / А.Г. Стромберг, Д.П. Семченко. – М.: Высшая школа, 2009. - 527 с.
2. Эткинс, П. Физическая химия: в 2 ч. Ч. 2. Физическая химия / П. Эткинс. – М.: Мир, 2009. – 584 с.
3. Тинок, И. Физическая химия. Принципы и применение в биологических науках / И. Тинок. - М.: Техносфера, 2005. – 743 с.
4. Романовский, Б.В. Основы химической кинетики / Б.В. Романовский. - М.: Издательство "Экзамен", 2006. — 416 с.
5. Эмануэль, Н.М. Курс химической кинетики / Н.М. Эмануэль, Д.Г. Кнорре. – М.: Высшая школа, 1984. – 463 с.
6. Денисов, Е.Т. Кинетика гомогенных химических реакций / Е.Т. Денисов. - М.: Высшая школа, 1988. – 392 с.