

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
материаловедения и индустрии наносистем



В.М. Иевлев
17.04.2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.О.23 Кинетика и катализ

- 1. Код и наименование направления подготовки/специальности:**
04.03.01 Химия
- 2. Профиль подготовки/специализация:** химия
- 3. Квалификация (степень) выпускника:** бакалавр
- 4. Форма обучения:** очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** кафедра материаловедения и индустрии наносистем
- 6. Составители программы:** Томина Елена Викторовна, доктор химических наук, доцент
- 7. Рекомендована:** научно-методическим советом химического факультета, протокол № 4 от 11.04.2024
- 8. Учебный год:** 2026-2027
Семестр(ы): 5

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Сформировать основные представления о химической кинетике как теоретическом фундаменте для изучения механизмов простых и сложных, гомогенных и гетерогенных реакций, познакомить с основными закономерностями гомогенного и гетерогенного катализа, рассмотреть сопряжение и индукцию в химических реакциях.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Б1, обязательная часть

Требования к входным знаниям, умениям и навыкам: для освоения курса студенты должны иметь теоретическую и практическую подготовку по дисциплинам «Физическая химия», «Математика».

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3.1	Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	Знать: основные понятия и законы химической кинетики как основу для изучения механизмов химических реакций разных типов, особенности кинетического описания реакций в конденсированной фазе, модели зародышеобразования и диффузионные модели в кинетике топохимических реакций, основные типы механизмов гомогенного катализа и характерные черты гетерогенного катализа; Уметь: использовать теоретические знания для решения конкретных задач химической кинетики Владеть: навыками применения знаний и умений для интерпретации механизма гомогенных, гетерогенных, каталитических реакций.
		ОПК-3.2	Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	Знать: феноменологическое описание реакций разных порядков Уметь: определять порядок и константу скорости реакции, период полупревращения, эффективную энергию активации на основе экспериментальных данных о свойствах системы с использованием стандартного программного обеспечения Владеть: навыками интерпретации механизма процессов получения широкого круга материалов, включая объекты, полученные самостоятельно в рамках научно-исследовательской деятельности.

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/часах в соответствии с учебным планом — 3/108.

Форма промежуточной аттестации – зачет.

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		5 семестр	6 семестр	...
Контактная работа	72	72		
в том числе:	лекции	36	36	
	практические	36	36	
	лабораторные	-		
	курсовая работа	-		
Самостоятельная работа	36	36		
Промежуточная аттестация (для экзамена)				
Итого:	108	108		

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК *
1. Лекции			
1.1	Основные понятия и законы химической кинетики. Формально - кинетическое описание реакций простых типов.	Скорость химической реакции. Элементарная стадия и элементарный акт химической реакции. Энергия активации. Закон действующих масс. Классификация химических реакций. Закрытые и открытые системы. Реакторы идеального смешения и идеального вытеснения. Односторонние реакции 1,2, n порядка. Двусторонние реакции 1,2 порядков. Определение порядка реакции.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9458 ЭУМК «Кинетика и катализ» на портале ВГУ «Электронный университет»
1.2	Теоретические основы кинетики гомогенных реакций.	Теория активных соударений. Теория активированного комплекса. Основное уравнение теории активированного комплекса. Энтальпия активации. Энтропия активации. Схема Линдемана.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9458 ЭУМК «Кинетика и катализ» на портале ВГУ «Электронный университет»
1.3	Кинетика сложных химических реакций	Сложные реакции. Последовательные и параллельные реакции. Циклический маршрут. График Раковского. Лимитирующая стадия. Схема сложного химического процесса. Цепные реакции и их механизмы.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9458 ЭУМК «Кинетика и катализ» на портале ВГУ «Электронный университет»
1.4	Кинетика гетерогенных реакций	Основные типы гетерогенных реакций. Степень превращения и степень завершенности химической реакции. Открытые гетерогенные системы. Топохимические реакции. Модели	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9458 ЭУМК «Кинетика и катализ» на портале ВГУ «Электронный университет»

		зародышеобразования и диффузионные модели. Макрокинетика топохимических реакций.	
1.5	Катализ и индукция в химических реакциях.	Характерные особенности кинетики каталитических реакций. Типы механизмов гомогенного катализа. Энергетические диаграммы. Гетерогенный катализ. Сопряжение и индукция в химических реакциях	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9458 ЭУМК «Кинетика и катализ» на портале ВГУ «Электронный университет»
2. Практические занятия			
2.1	Формально - кинетическое описание реакций простых типов.	Односторонние реакции 1,2, n порядка. Двусторонние реакции 1,2 порядков. Определение порядка реакции.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9458 ЭУМК «Кинетика и катализ» на портале ВГУ «Электронный университет»
2.2	Элементарные химические реакции.	Реакционный центр активированного комплекса и его виды. Правило запрета Вудворда-Хофмана.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9458 ЭУМК «Кинетика и катализ» на портале ВГУ «Электронный университет»
2.3	Кинетическое описание сложных реакций.	Построение стехиометрической матрицы и матрицы состава на примере реакции хлорирования этилена	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9458 ЭУМК «Кинетика и катализ» на портале ВГУ «Электронный университет»
2.4	Гетерогенные реакции	Гетерогенные реакции с нулевой и ненулевой начальной скоростью. Активирование реагентов.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9458 ЭУМК «Кинетика и катализ» на портале ВГУ «Электронный университет»
2.5	Катализ и индукция в химических реакциях.	Теории катализа. Автокатализ. Ферментативный катализ.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9458 ЭУМК «Кинетика и катализ» на портале ВГУ «Электронный университет»

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Основные понятия и законы химической кинетики..	4	4		4	16
2	Теоретические основы кинетики гомогенных реакций.	8	8		8	24
3	Кинетика сложных химических реакций	8	8		8	24
4	Кинетика гетерогенных реакций	8	8		8	24
5	Катализ и индукция в химических реакциях.	8	8		8	24
	Итого:	36	36		36	108

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

(рекомендации обучающимся по освоению дисциплины: работа с конспектами лекций, презентационным материалом, выполнение практических заданий, тестов, заданий текущей аттестации и т.д.)

Организация изучения дисциплины предполагает использование ЭУМК «Кинетика и катализ» на портале ВГУ «Электронный университет». В процессе изучения дисциплины предполагается: работа с литературными источниками, решение задач, подготовка и выполнение тестов.

Задачи по формальной кинетике приведены в учебно-методическом пособии Кинетика и катализ: сборник задач и вопросов : учебно-методическое пособие / сост.: Е. В. Томина, И. Я. Миттова, Б. В. Сладкопеевцев, А. А. Соловьева, Л. С. Зеленина. – Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2017. – 19 с.

При подготовке к выполнению тестов студенты должны выполнить пробные тестовые задания из следующего учебного пособия:

Основные представления и законы химической кинетики. Теоретические основы кинетики гомогенных реакций : (контрольные вопросы для тестирования по курсу "Кинетика и катализ") : учебное пособие : [для спец.: 020101 (011000) - Химия] / Воронеж. гос. ун-т; сост.: И.Я. Миттова [и др.] — Воронеж : ИПЦ ВГУ, 2007. — 12 с.

Текущий контроль освоения дисциплины осуществляется при выполнении студентами тестов. При наборе при выполнении ВСЕХ! тестов более 50% максимально возможного числа баллов студентам может быть выставлен зачет автоматом

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины (список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Стромберг А.Г. Физическая химия : [учебник для студ. вузов, обуч. по хим. специальностям] / А.Г. Стромберг, Д.П. Семченко ; под ред. А.Г. Стромберга. — Изд. 7-е, стер. — Москва : Высшая школа, 2009. — 526 с.
2	Чоркендорф, И. Современный катализ и химическая кинетика : [учебное пособие] / И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт ; пер. с англ. В.И. Ролдугина. — 2-е изд. — Долгопрудный : Издательский дом Интеллект, 2013. — 500 с.
3	Леенсон И. А.. Как и почему происходят химические реакции. Элементы химической термодинамики и кинетики : [учебное пособие] / И.А. Леенсон. — Долгопрудный : Интеллект, 2010. — 222 с.
4	Булидорова, Г. В. Кинетика гетерогенных и каталитических реакций : учебное пособие / Булидорова Г. В. - Казань : Издательство КНИТУ, 2017. - 111 с. - ISBN 978-5-7882-2240-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785788222400.html (дата обращения: 12.05.2022). - Режим доступа : по подписке.
5	Лефедова, О. В. Химическая кинетика и катализ : учеб. пособие / Лефедова О. В. - Иваново : Иван. гос. хим. -технол. ун-т., 2016. - 167 с. - ISBN --. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : https://www.studentlibrary.ru/book/ghtu_012.html (дата обращения: 12.05.2022). - Режим доступа : по подписке.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
6	Третьяков Ю.Д.. Введение в химию твердофазных материалов : учебное пособие для студ. вузов, обуч. по направлению подгот. "Химия, физика и механика материалов" / Ю.Д. Третьяков, В.И. Путляев ; Моск. гос. ун-т им. М.В. Ломоносова. — М. : Изд-во Моск. ун-та :

	Наука, 2006 .— 399 с.
7	Физическая химия: в 2-х кн. / К. С. Краснов и др. - М. : Высш. шк., 2001. - Кн.2. - 318 с.
8	Крылов О.В. Гетерогенный катализ / О.В. Крылов. - М. : Академкнига, 2004. - 679 с.
9	Байрамов В.М. Основы химической кинетики и катализа / В.М. Байрамов; под ред. В.В. Лунина. - М. : Academia, 2003. - 251 с.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)*:

№ п/п	Ресурс
10	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9458 ЭУМК «Кинетика и катализ» на портале ВГУ «Электронный университет»
11	ЭБС IPR BOOKS — Режим доступа: http://www.iprbookshop.ru/
12	https://www.lib.vsu.ru/ - сайт Зональной Научной Библиотеки Воронежского государственного университета
13	http://www.en.edu.ru/ - Естественно-научный образовательный портал - является составной частью федерального портала "Российское образование". Содержит ресурсы и ссылки на ресурсы по естественно-научным дисциплинам (физика, химия и биология)
14	http://window.edu.ru/ - информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам»
15	http://www.elibrary.ru – Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU - крупнейший российский информационный портал в области науки, технологии, медицины и образования, содержащий рефераты и полные тексты более 12 млн. научных статей и публикаций. На платформе eLIBRARY.RU доступны электронные версии более 1400 российских научно-технических журналов, в том числе более 500 журналов в открытом доступе.
16	http://www.chem.msu.ru/rus/ - Chemnet - официальное электронное издание Химического факультета МГУ в Internet

* Вначале указываются ЭБС, с которыми имеются договора у ВГУ, затем открытые электронно-образовательные ресурсы

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных) работ и др.)

№ п/п	Источник
1	Миттова И.Я. Основные представления и законы химической кинетики. Теоретические основы кинетики гомогенных реакций : учебное пособие : специальность 020101 (011000) - Химия / И.Я. Миттова, С.С. Лаврушина, В.Ф. Кострюков ; Воронеж. гос. ун-т. — Воронеж : ЛОП ВГУ, 2005 .— 59 с. : ил. — ксерокопия .— Библиогр.: с. 58 .
2	Основные представления и законы химической кинетики. Теоретические основы кинетики гомогенных реакций : (контрольные вопросы для тестирования по курсу "Кинетика и катализ") : учебное пособие : [для спец.: 020101 (011000) - Химия] / Воронеж. гос. ун-т; сост.: И.Я. Миттова [и др.] .— Воронеж : ИПЦ ВГУ, 2007 .— 12 с.
3	Основные понятия и механизмы каталитических и сопряженных реакций. Неравновесные процессы в катализе. (Классические системы) : учебное пособие для вузов : [для магистрантов хим. фак. первого года обучения направлений : 020300- Химия, физика и механика материалов; 020100- Химия] / Воронеж. гос. ун-т ; сост.: И.Я. Миттова, А.А. Самсонов, Б.В. Сладкопечев .— Воронеж : ИПЦ ВГУ, 2012 .— 97 с. : ил. — Библиогр.: с. 95-97.
4	Кинетика и катализ: сборник задач и вопросов : учебно-методическое пособие / сост.: Е. В. Томина, И. Я. Миттова, Б. В. Сладкопечев, А. А. Соловьева, Л. С. Зеленина. – Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2017. – 19 с.

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ), электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):

При реализации дисциплины используются элементы электронного обучения и дистанционные образовательные технологии: ЭУМК «Кинетика и катализ» на портале Электронный университет.

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Монитор, ноутбук, проектор

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Основные понятия и законы химической кинетики..	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2	Устный опрос Решение задач Тест № 1
2.	Теоретические основы кинетики гомогенных реакций.	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2	Устный опрос Решение задач Тест №2
3.	Кинетика сложных химических реакций	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2	Устный опрос Тест №3
4.	Кинетика гетерогенных реакций	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2	Устный опрос
5.	Катализ и индукция в химических реакциях.	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2	Устный опрос
Промежуточная аттестация форма контроля – зачёт				Перечень вопросов Практико-ориентированные задачи

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1 Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Устный опрос
Решение задач
Тест

Примеры задач для решения:

1. Для элементарной газофазной реакции $\text{H}_2 + \text{Ar} = 2\text{H} + \text{Ar}$ значение константы скорости при 3000 К равно $2,2 \cdot 10^4 \text{ л} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$. Определите

скорость этой реакции, если известны концентрации $[H_2] = 4,1 \cdot 10^{-3}$ М и $[Ar] = 4,1 \cdot 10^{-4}$ М. При каком значении концентрации аргона скорость реакции увеличивается вдвое?

2. Через какой промежуток времени прореагирует половина исходного вещества в реакции нулевого порядка $A \rightarrow B + C$, если известны $[A_0] = 1,0$ М и константа скорости $k = 0,05$ моль \cdot л $^{-1} \cdot$ мин $^{-1}$

3. Вычислите начальную скорость разложения вещества А при 37 °С в см 3 /мин, если величина константы скорости этой реакции равна $4,2 \cdot 10^{-2}$ л/(моль \cdot с), а начальное давление вещества А равно $2,67 \cdot 10^4$ Па.

4. Начальная скорость бимолекулярной реакции $A + B \rightarrow C$ равна a моль/см \cdot с). Парциальное давление первого из исходных веществ равно P Па, а концентрация второго – b см $^{-3}$. Вычислите величину константы скорости реакции в Па $^{-1} \cdot$ с $^{-1}$.

5. В процессе *цис-транс* превращения дихлорэтана измерялось изменение процентного содержания *транс*-изомера со временем. Определите порядок реакции и вычислите константу скорости из приведенных ниже данных:

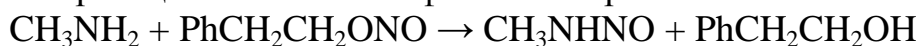
Время, часы	0	0,5	1,0	2,0	3,0	4,0	5,0	6,0
Содержание <i>транс</i>-изомера, %	0	8	15	29	40	50	57	64

6. При щелочном гидролизе аллилхлорида в 50%-м водном спирте были получены следующие результаты:

Время, часы	0	6,6	19,0	26,2	42,8	66,9
$[C_3H_5Cl]$, моль/л	0,1214	0,1148	0,1064	0,1020	0,0945	0,0871
$[OH^-]$, моль/л	0,0515	0,0449	0,0365	0,0321	0,0246	0,0175

Определите порядок и вычислите константу скорости реакции из приведенных выше экспериментальных данных.

7. Кинетика реакции аминолиза фенэтилнитрита



исследовалась методом отбора проб. Ниже приведена зависимость количества 0,05 н. раствора HCl, пошедшего на титрование пробы реакционной смеси (5 мл), от времени:

Время, мин	0	300	420	545	1305	∞
Количество HCl, мл	8,14	7,33	7,11	6,90	5,74	2,21

Найдите из этих данных величину константы скорости реакции

8. При повышении температуры от 60 до 70 °С константа скорости реакции возросла в два раза. Вычислите энергию активации этой реакции. Точностью определения константы скорости пренебречь.

9. При изучении кинетики распада диэтилперекиси получены следующие значения величин констант скорости реакции при различных температурах:

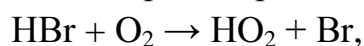
Температура, °С	140,0	147,8	156,5	184,5
$k \cdot 10^4, \text{с}^{-1}$	1,75	3,6	6,67	78,8

Рассчитайте энергию активации и предэкспоненциальный множитель.

10. Вычислите энергию активации и предэкспоненциальный множитель для реакции на основании следующих данных об изменении констант скорости с изменением температуры:

Температура, °С	356	427	508
$k, \text{с}^{-1}$	0,0295	1,15	39,6

11. Реакцию окисления бромоводорода, протекающую по уравнению



исследовали при различных температурах. При этом была получена следующая зависимость константы скорости реакции от температуры:

Температура, К	700	762	800
$k, \text{см}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$	5,1	46,2	151

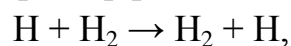
Рассчитайте энергию активации и предэкспоненциальный множитель.

12. Определите энергию активации и предэкспоненциальный множитель реакции из следующей зависимости времен полупревращения от температуры:

Температура, °С	529,5	538,5	550,5	560,0
$T_{1/2}, \text{с}$	66,5	44,3	29,6	14,6

Начальное давление равно 200 Па, порядок реакции – 3/2.

13. Чему равен стерический фактор реакции

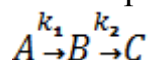


если константа скорости этой реакции при 27 °С равна $7,3 \cdot 10^7 \text{ см}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$, а энергия активации – 34,3 кДж/моль? Величины газокинетических сечений для атомов и молекул водорода равны $1,35 \cdot 10^{-8}$ и $2,7 \cdot 10^{-8} \text{ см}^2$ соответственно.

14. В условиях ацетоллиза тетраацетата β ,D-глюкопиранозиды (A) наряду с пентаацетатом D-глюкопиранозы (B) образуется также некоторое количество побочного продукта C. Рассчитайте величины констант скоростей соответствующих реакций из приведенных ниже зависимостей концентраций веществ A и C от времени:

Время, мин	0	10	20	30	90	120
[A], усл.ед.	1	0,921	0,845	0,782	0,465	0,323
[C], усл.ед.	0	0,006	0,012	0,021	0,036	0,06

15. Определите в последовательной реакции



предельное отношение начальной концентрации $\frac{[A]_0}{[B]_0}$, при котором можно наблюдать максимум на кинетической кривой для вещества B , если величина отношения $\frac{k_1}{k_2} = 10$.

Перечень тестовых заданий:

1. Тест № 1. Основные понятия и законы химической кинетики. Формально - кинетическое описание реакций простых типов.

Вариант №1

A1. Выражение $t = \frac{\ln 2}{k}$ является выражением для определения:

- а) времени полупревращения для односторонних реакций первого порядка;
- б) времени полупревращения для односторонних реакций второго порядка;
- в) времени полупревращения для односторонних реакций n -го порядка;
- г) времени полупревращения для односторонних реакций третьего порядка.

A2. Что является определением кинетической кривой

- а) кривая, изображающая изменение натурального логарифма от времени;
- б) кривая, изображающая изменение десятичного логарифма концентрации от времени;
- в) кривая, изображающая изменение концентрации какого-либо компонента от времени;
- г) кривая, изображающая изменение скорости реакции от времени.

A3. Может ли порядок реакции быть нулевым, дробным, отрицательным?

A4. Основной постулат химической кинетики. Физический смысл константы скорости реакции.

B1. Сформулировать принцип независимости элементарных стадий, следствие, вытекающее из него и его математическую формулировку.

B2. Запишите выражение для скорости реакции $N_2 + 3H_2 = 2NH_3$ по компонентам.

C1. Для реакции первого порядка получить дифференциальное и интегральное уравнение зависимости концентрации от времени. Найти время полупревращения.

Вариант №2

A1. Выражение $t = \frac{1}{kC_0}$ является выражением для определения:

- а) времени полупревращения для односторонних реакций первого порядка;
- б) времени полупревращения для односторонних реакций второго порядка;
- в) времени полупревращения для односторонних реакций n -го порядка;
- г) времени полупревращения для односторонних реакций третьего порядка.

A2. Указать неправильный вариант выражения для скорости реакции по i -компоненту

а) $v_i = \frac{dn_i}{v dt}$ б) $v_i = \frac{dn_i}{v_i v dt}$

в) $v_i = \frac{dn_i}{s dt}$ г) $v_i = v_i U$

A3. Сформулируйте прямую и обратную задачи в кинетике простых реакций. Какие экспериментальные и расчетные данные требуются для решения этих задач?

A4. Как определяются истинная (мгновенная) и средняя скорости химической реакции аналитически и графически?

B1. Перечислить экспериментальные методы получения кинетических кривых.

B2. При изменении начальной концентрации с 1 до 3 моль/л период полураспада реакции уменьшается с 3 часов до 20 минут. Найдите константу скорости реакции.

C1. Выведите дифференциальное и интегральное кинетические уравнения зависимости концентрации от времени для реакций нулевого порядка. Какова размерность константы скорости в этом случае?

Вариант №3

A1. Выражение $t = \frac{C_0}{2k}$ является выражением для определения:

- а) времени полупревращения для односторонних реакций первого порядка;
- б) времени полупревращения для односторонних реакций второго порядка;
- в) времени полупревращения для односторонних реакций нулевого порядка;
- г) времени полупревращения для односторонних реакций третьего порядка.

A2. Для реакции $2NO + Cl_2 \rightarrow 2NOCl$ скорость по компоненту NO равна:

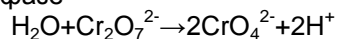
- а) $v_{NO} = -\frac{d[NO]}{dt}$
- б) $v_{NO} = \frac{d[NO]}{2dt}$
- в) $v_{NO} = -\frac{d[NO]}{2dt}$
- г) $v_{NO} = -\frac{2d[NO]}{dt}$

A3. Какую информацию о химической реакции можно получить из зависимости концентрации реагирующего вещества от времени?

A4. Как называется реакция, для которой реакционным пространством служит граница раздела фаз? Дайте определение фазы.

B1. В чем заключается метод изолирования Оствальда, или понижении порядка реакции? В каком случае он применяется?

B2. Химическая реакция в жидкой фазе



Характеризуется кинетическим уравнением, идентичным стехиометрическому. Написать выражение скорости реакции через концентрации реагирующих веществ.

C1. Для реакции второго порядка получить дифференциальное и кинетическое уравнение зависимости концентрации от времени при равенстве начальных концентраций. Найти время полупревращения. От каких величин зависит $t_{1/2}$ в этом случае?

Вариант №4

A1. Выражение $t = \frac{3}{2kC_0^2}$ является выражением для определения:

- а) времени полупревращения для односторонних реакций первого порядка;
- б) времени полупревращения для односторонних реакций второго порядка;
- в) времени полупревращения для односторонних реакций нулевого порядка;
- г) времени полупревращения для односторонних реакций третьего порядка.

A2. Для реакции $2N_2O \rightarrow 2N_2 + O_2$ скорость по компоненту N_2O равна:

- а) $v_{N_2O} = -\frac{d[N_2O]}{dt}$
- б) $v_{N_2O} = \frac{d[N_2O]}{2dt}$
- в) $v_{N_2O} = -\frac{d[N_2O]}{2dt}$
- г) $v_{N_2O} = -\frac{2d[N_2O]}{dt}$

A3. Как определяется скорость химической реакции в целом? Как эта величина связана со скоростью реакции по данному компоненту?

A4. Для каких реакций концентрация исходного вещества всегда линейно уменьшается со временем?

B1. Раскрыть суть методов определения порядков реакции: метода подстановки и графического метода.

B2. Как можно сравнить эффективность реакторов идеального смешения и идеального вытеснения? У какого из них она выше?

C1. Для реакции нулевого порядка получить дифференциальное и кинетическое уравнение зависимости концентрации от времени при равенстве начальных концентраций. Найти время полупревращения.

Вариант №5

A1. Какая из формул не является выражением для определения времени полупревращения

- а) $t = \frac{\ln 2}{k}$
- б) $t = \frac{C_0}{k}$
- в) $t = \frac{C_0}{2k}$
- г) $t = \frac{1}{kC_0}$

A2. В чем отличие выражений $v = -\frac{1}{n} \frac{dC}{dt}$ и $v = -\frac{1}{C} \frac{dC}{dt}$ (n и C - соответственно число молей и концентрация исходного вещества)?

A3. Что означает термин «период полураспада»?

A4. Для реакции $2A + B \rightarrow 2C + D + B$, $-\frac{dC_A}{dt} = kC_A C_B$ определить порядок реакции по компонентам n_i и суммарный n:

- а) $n_A=2, n=3$ б) $n_B=1, n=3$
 в) $n_A=1, n=2$ г) $n_B=1, n=2$.

V1. В чем заключается «идеальность» реакторов идеального смешения и идеального вытеснения? Какой режим в этих реакторах называется стационарным? Вывести уравнение для скорости реакции для реактора идеального смешения.

V2. Увеличение начальной концентрации реактива вдвое вызывает удвоение времени полупревращения реакции. Определите порядок реакции по данному компоненту.

C1. Для реакции n -го порядка вывести дифференциальное и кинетическое уравнение зависимости концентрации от времени при равенстве начальных концентраций. Найти время полупревращения.

Вариант №6

A1. Для реакции $2N_2O_5 \rightarrow 2N_2O_4 + O_2$ скорость по компоненту N_2O_5 равна:

- а) $v_{N_2O_5} = -\frac{d[N_2O_5]}{dt}$ б) $v_{N_2O_5} = \frac{d[N_2O_5]}{dt}$
 в) $v_{N_2O_5} = -\frac{d[N_2O_5]}{2dt}$ г) $v_{N_2O_5} = -\frac{2d[N_2O_5]}{dt}$.

A2. Что является определением кинетической кривой

- а) кривая, изображающая изменение концентрации какого-либо компонента от времени;
 б) кривая, изображающая изменение десятичного логарифма концентрации от времени;
 в) кривая, изображающая изменение натурального логарифма от времени;
 г) кривая, изображающая изменение скорости реакции от концентрации исходных веществ.

A3. Может ли скорость реакции быть отрицательной величиной? Что означает запись $v = -\frac{dC_A}{dt}$ для реакции $A \rightarrow B$?

A4. Изобразите графически зависимость концентрации продукта реакции от времени в случае реакции нулевого порядка.

V1. Что означает термин время полупревращения и средняя продолжительность жизни молекул реагирующего вещества? Найти время полупревращения для реакции нулевого порядка. Изобразить графически зависимость концентрации продукта реакции от времени.

V2. Раскрыть суть методов определения порядков реакции: метода подстановки и графического метода.

C1. Для реакции первого порядка, протекающей при одинаковых начальных концентрациях реагентов ($C_0=1M$), половина исходного вещества превращается за время, равное $t_{1/2}$. Сколько требуется времени (выразить в $t_{1/2}$), чтобы практически все количество исходного вещества превратилось в продукты?

Вариант №7

A1. Для реакции $A + 2B \rightarrow C + D, \frac{dC_C}{dt} = kC_A C_B^2 C_C$ определить порядок реакции по

компонентам n_i и суммарный порядок n :

- а) $n_A=1, n_B=2, n_C=1, n_D=1, n=3$ б) $n_A=1, n_B=2, n_C=1, n_D=1, n=5$
 в) $n_A=1, n_B=2, n_C=1, n_D=0, n=4$ г) $n_A=1, n_B=2, n_C=0, n_D=0, n=3$.

A2. Указать неправильный вариант выражения для скорости реакции по i -компоненту

- а) $v_i = \frac{dn_i}{vdt}$ б) $v_i = \frac{dn_i}{v_i v dt}$
 в) $v_i = \frac{dn_i}{sdt}$ г) $v_i = v_i U$.

A3. Как записать в общем случае выражение для скорости обратимой реакции?

A4. Основной постулат химической кинетики? Физический смысл константы скорости реакции?

V1. Как определяется из уравнения Аррениуса энергия активации химической реакции? Какой вид может иметь график в аррениусовских координатах? Рассмотреть общий и частный случаи.

V2. Скорость газофазных реакций может быть выражена через парциальное давление P_i , концентрацию C_i и изменение количества одного из веществ. Получить соотношения, связывающие эти выражения.

C1. Для реакции второго порядка получить дифференциальное и кинетическое уравнение зависимости концентрации от времени, представить решение в виде кинетических кривых. Найти время полупревращения.

Вариант №8

A1. Выражение $k = \frac{1}{t_{1/2}} \ln 2$ является выражением для определения:

- а) константы скорости двусторонней реакции первого порядка;
- б) константы скорости двусторонней реакции второго порядка;
- в) константы скорости односторонней реакции первого порядка;
- г) константы скорости односторонней реакции второго порядка.

A2. Какая из формул не является выражением для определения времени полупревращения

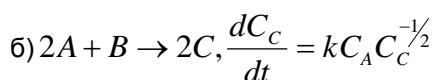
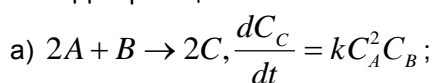
а) $t = \frac{\ln 2}{k}$ в) $t = \frac{C_0}{2k}$
 б) $t = \frac{1}{kC_0}$ г) $t = \frac{2k}{C_0}$

A3. Каковы экспериментальные методы исследования химических реакций? Медленных? Быстрых?

A4. Что называется порядком реакции по веществу и общим (полным) порядком реакции?

B1. Напишите выражение для константы скорости реакции первого порядка, используя начальную и текущую концентрации реагирующего вещества. Какова размерность константы скорости реакции первого, второго, третьего, нулевого порядков реакции?

B2. Для реакций



определить порядок по компонентам и суммарный порядок реакции.

C1. Получить кинетическое уравнение для реакции n-го порядка и найти время полупревращения.

Вариант №9

A1. Выражение $k = \frac{(C_0 - C)}{t}$ является выражением для определения:

- а) константы скорости двусторонней реакции первого порядка
- б) константы скорости двусторонней реакции второго порядка
- в) константы скорости односторонней реакции первого порядка
- г) константы скорости односторонней реакции нулевого порядка

A2. Выражение $t = \frac{\ln 2}{k}$ является выражением для определения:

- а) времени полупревращения для односторонних реакций первого порядка;
- б) времени полупревращения для односторонних реакций второго порядка;
- в) времени полупревращения для односторонних реакций третьего порядка;
- г) времени полупревращения для односторонних реакций n-го порядка.

A3. Как зависит (покажите графически) константа скорости реакции от исходной концентрации веществ?

A4. Может ли порядок реакции быть нулевым, дробным, отрицательным?

B1. Как определяется из уравнения Аррениуса энергия активации химической реакции? Какой вид может иметь график в аррениусовских координатах? Рассмотреть общий и частный случаи.

B2. Запишите выражение для скорости реакции $N_2 + 3H_2 = 2NH_3$ по компонентам.

C1. Для реакции нулевого порядка, протекающей при одинаковых начальных концентрациях реагентов ($C_0 = 1M$), половина исходного вещества превращается за время, равное $t_{1/2}$. Сколько требуется времени (выразить в $t_{1/2}$), чтобы практически все количество исходного вещества превратилось в продукты?

Вариант №10

A1. Выражение $k = \frac{(C_0 - C)}{C_0 C t}$ является выражением для определения:

- а) константы скорости двусторонней реакции первого порядка
- б) константы скорости двусторонней реакции второго порядка
- в) константы скорости односторонней реакции первого порядка
- г) константы скорости односторонней реакции второго порядка

A2. Выражение $t = \frac{1}{kC_0}$ является выражением для определения:

- а) времени полупревращения для односторонних реакций первого порядка;
- б) времени полупревращения для односторонних реакций второго порядка;
- в) времени полупревращения для односторонних реакций третьего порядка;
- г) времени полупревращения для односторонних реакций n-го порядка.

A3. Зависит ли уравнение кинетической кривой от исходных концентраций реагентов? От типа системы?

A4. Основной постулат химической кинетики. Физический смысл константы скорости реакции.

B1. Сформулировать принцип независимости элементарных стадий, следствие, вытекающее из него и его математическую формулировку.

B2. Скорость газофазных реакций может быть выражена через парциальное давление P_i , концентрацию C_i и изменение количества одного из веществ. Получить соотношения, связывающие эти выражения.

C1. Что означает термин время полупревращения и средняя продолжительность жизни молекул реагирующего вещества? Найти время полупревращения для реакции нулевого порядка. Изобразить графически зависимость концентрации продукта реакции от времени.

Вариант №11

A1. Для реакции $2\text{N}_2\text{O}_5 \rightarrow 4\text{NO}_2 + \text{O}_2$ скорость по компоненту N_2O_5 равна:

а) $v_{\text{N}_2\text{O}_5} = -\frac{d[\text{N}_2\text{O}_5]}{dt}$

б) $v_{\text{N}_2\text{O}_5} = \frac{d[\text{N}_2\text{O}_5]}{dt}$

в) $v_{\text{N}_2\text{O}_5} = -\frac{d[\text{N}_2\text{O}_5]}{2dt}$

г) $v_{\text{N}_2\text{O}_5} = -\frac{2d[\text{N}_2\text{O}_5]}{dt}$

A2. Для реакции $A + 2B \rightarrow C + D$, $\frac{dC_C}{dt} = kC_A C_B^2 C_C$ определить порядок реакции по

компонентам n_i и суммарный порядок n :

а) $n_A=1, n_B=2, n_C=1, n_D=1, n=3$

б) $n_A=1, n_B=2, n_C=1, n_D=1, n=5$

в) $n_A=1, n_B=2, n_C=1, n_D=0, n=4$

г) $n_A=1, n_B=2, n_C=0, n_D=0, n=3$

A3. Укажите размерность константы скорости реакции второго порядка. Можно ли сравнивать константы скорости реакций разных порядков?

A4. В чем заключается «идеальность» реакторов идеального смешения и идеального вытеснения? Какой режим в этих реакторах называется стационарным?

B1. Раскрыть суть определения порядка реакции по времени полупревращения.

B2. Увеличение начальной концентрации реагента вдвое вызывает удвоение времени полупревращения реакции. Определите порядок реакции по данному компоненту

C1. Выведите дифференциальное и интегральное кинетические уравнения зависимости концентрации от времени для реакций нулевого порядка. Какова размерность константы скорости в этом случае?

Вариант №12

A1. Какое из выражений является выражением для нахождения времени полупревращения для реакции первого порядка

а) $t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$

в) $t_{1/2} = \frac{C_0}{2k}$

б) $t_{1/2} = \frac{1}{kC_0}$

г) $t_{1/2} = \frac{2k}{C_0}$

A2. Выражение $t_{1/2} = \frac{a}{2kC_0^2}$ является выражением для определения:

а) времени полупревращения для односторонних реакций первого порядка;

б) времени полупревращения для односторонних реакций второго порядка;

в) времени полупревращения для односторонних реакций третьего порядка;

г) времени полупревращения для односторонних реакций нулевого порядка.

A3. Как определяется скорость химической реакции в целом? Как эта величина связана со скоростью реакции по данному компоненту?

A4. Может ли молекулярность быть больше или меньше порядка реакции? Для каких реакций порядок и молекулярность всегда совпадают?

B1. Напишите выражение для константы скорости реакции первого порядка, используя начальную и текущую концентрации реагирующего вещества. Какова размерность константы скорости реакции первого, второго, третьего, нулевого порядков реакции?

B2. Как определяется из уравнения Аррениуса энергия активации химической реакции? Какой вид может иметь график в аррениусовских координатах? Рассмотреть общий и частный случаи.

C1. Для реакции первого порядка получить дифференциальное и кинетическое уравнение зависимости концентрации от времени. Найти время полупревращения.

Вариант №13

A1. Для реакции $3A + 2B \rightarrow C + 4D$, $-\frac{dC_A}{dt} = kC_A C_B^2$ определить порядок реакции по

компонентам n_i и суммарный порядок n :

- а) $n_A=3, n_B=2, n_C=1, n_D=4, n=3$; б) $n_A=3, n_B=2, n_C=1, n_D=4, n=5$;
в) $n_A=3, n_B=2, n_C=0, n_D=0, n=5$; г) $n_A=1, n_B=2, n_C=0, n_D=0, n=3$.

A2. Что такое механизм химической реакции? Что понимается под схемой реакции?

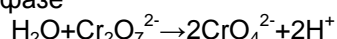
A3. Сформулировать закон действующих масс и дать его кинетический вывод.

A4. Что является определением кинетической кривой

- а) кривая, изображающая изменение концентрации какого-либо компонента от времени;
б) кривая, изображающая изменение десятичного логарифма концентрации от времени;
в) кривая, изображающая изменение натурального логарифма от времени;
г) кривая, изображающая изменение скорости реакции от времени.

B1. Сформулировать принцип независимости элементарных стадий, следствие вытекающее из него и его математическую формулировку.

B2. Химическая реакция в жидкой фазе



Характеризуется кинетическим уравнением, идентичным стехиометрическому. Написать выражение скорости реакции через концентрации реагирующих веществ.

C1. Получить кинетическое уравнение для реакции n -го порядка и найти время полупревращения.

Вариант №14

A1. Для реакции $2A + B \rightarrow 2C + D + B$, $-\frac{dC_A}{dt} = kC_A C_B$ определить суммарный порядок

реакции n и по компонентам n_i

- а) $n_A=2, n_B=1, n_C=2, n_D=1, n=3$; б) $n_A=1, n_B=1, n_C=0, n_D=0, n=2$;
в) $n_A=2, n_B=2, n_C=2, n_D=1, n=4$; г) $n_A=1, n_B=1, n_C=0, n_D=0, n=3$.

A2. Что является определением кинетической кривой

- а) кривая, изображающая изменение концентрации какого-либо компонента от времени;
б) кривая, изображающая изменение десятичного логарифма концентрации от времени;
в) кривая, изображающая изменение натурального логарифма от времени;
г) кривая, изображающая изменение скорости реакции от времени.

A3. Как зависит (покажите графически) константа скорости реакции от исходной концентрации веществ?

A4. Можно ли по виду кинетического уравнения сказать, какая рассматривалась реакция: односторонняя или двусторонняя?

B1. Как определяется из уравнения Аррениуса энергия активации химической реакции? Какой вид может иметь график в аррениусовских координатах? Рассмотреть общий и частный случаи.

B2. Запишите выражение для скорости реакции $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 = 2\text{NH}_3$ по компонентам.

C1. Для реакции второго порядка получить дифференциальное и кинетическое уравнение зависимости концентрации от времени при равенстве начальных концентраций. Найти время полупревращения.

Вариант №15

A1. Какое из выражений является выражением для нахождения времени полупревращения для реакции третьего порядка

- а) $\frac{\ln 2}{k}$ в) $\frac{C_0}{2k_3}$
б) $\frac{1}{kC_0}$ г) $\frac{1}{2kC_0^2}$

A2. Для реакции $2A \rightarrow 4B + C$, $-\frac{dC_A}{dt} = kC_A$ определить суммарный порядок реакции n и

порядки по компонентам n_i

- а) $n_A=1, n_B=0, n_C=0, n=1$; б) $n_A=1, n_B=1, n_C=0, n=2$;
в) $n_A=2, n_B=4, n_C=1, n=4$; г) $n_A=1, n_B=1, n_C=0, n=3$.

A3. Как определяется истинная (мгновенная) и средняя скорость химической реакции аналитически и графически?

A4. В чем заключается принцип независимости элементарных стадий? При каких условиях он соблюдается?

B1. Сформулировать принцип независимости элементарных стадий, следствие, вытекающее из него и его математическую формулировку.

B2. Сформулировать принцип независимости элементарных стадий, следствие, вытекающее из него и его математическую формулировку.

C1. Для реакции первого порядка, протекающей при одинаковых начальных концентрациях реагентов ($C_0=1M$), половина исходного вещества превращается за время, равное $t_{1/2}$. Сколько требуется времени (выразить в $t_{1/2}$), чтобы практически все количество исходного вещества превратилось в продукты?

Вариант16

A1. Для реакции $A + B \rightarrow C$, $\frac{dC_C}{dt} = kC_A C_B^{-1}$ определить суммарный порядок реакции и по

компонентам

а) $n_A=1, n_B=1, n_C=1, n=3$; б) $n_A=1, n_B=-1, n_C=0, n=0$;

в) $n_A=1, n_B=-1, n_C=1, n=1$; г) $n_A=1, n_B=1, n_C=0, n=2$.

A2. Выражение $t_{1/2} = \frac{3}{2kC_0^2}$ является выражением для определения:

а) времени полупревращения для односторонних реакций первого порядка;

б) времени полупревращения для односторонних реакций второго порядка;

в) времени полупревращения для односторонних реакций третьего порядка;

г) времени полупревращения для односторонних реакций нулевого порядка.

A3. Может ли скорость реакции быть отрицательной величиной? Ответ мотивируйте.

A4. Определение элементарного акта и элементарной реакции.

B1. Напишите выражение для константы скорости реакции первого порядка, используя начальную и текущую концентрации реагирующего вещества. Какова размерность константы скорости реакции первого, второго, третьего, нулевого порядков реакции?

B2. Для реакций

а) $2A + B \rightarrow 2C$, $\frac{dC_C}{dt} = kC_A^2 C_B$;

б) $2A + B \rightarrow 2C$, $\frac{dC_C}{dt} = kC_A C_C^{-1/2}$

определить порядок по компонентам и суммарный порядок реакции.

C1. Что означает термин время полупревращения и средняя продолжительность жизни молекул реагирующего вещества? Найти время полупревращения для реакции нулевого порядка. Изобразить графически зависимость концентрации продукта реакции от времени.

Раздел 2. Теоретические основы кинетики гомогенных реакций. Элементарные химические реакции.

ВАРИАНТ 1.

A1. Каким образом общее число двойных столкновений (Z) зависит от температуры и давления?

а) Z слабо зависит от температуры и не зависит от давления;

б) Z растет пропорционально $T^{1/2}$ и P^2 ;

в) $Z \sim T^{-1}$ и P^2 ;

г) Z не зависит от T и P .

A2. Какой вид имеет основное уравнение для полной скорости мономолекулярной реакции в теории Линдемана?

а) $-\frac{d[A]}{dt} = k_{\infty} [A]$;

б) $-\frac{d[A]}{dt} = k_{\infty} [A]^2$;

в) $-\frac{d[A]}{dt} = \frac{k_1 k_3 [A]^2}{k_2 [A] + k_3}$;

г) $-\frac{d[A]}{dt} = \frac{k_1 k_2 k_3 [A]^2}{k_1 k_2 [A] + k_3}$.

A3. Что из себя представляет d_{∞} в формуле Сезерленда?

а) расстояние между бесконечно удаленными молекулами;

б) диаметр молекулы стремящийся к бесконечности;

в) газокинетический диаметр молекулы при $T \rightarrow \infty$;

г) расстояние между бесконечно удаленными атомами.

A4. Что означает термин путь реакции, координата реакции?

A5. Чем вызвана необходимость введения понятия «реакционный центр активированного комплекса»? Что такое реакционный центр?

B1. Получите и проанализируйте выражение для константы скорости k бимолекулярной реакции для молекул разного сорта. От каких параметров зависит k ?

B2. В каких реакциях имеют место затруднения, связанные с орбитальной симметрией: с линейным или циклическим активированным комплексом? Каковы примеры реакций, разрешенных и запрещенных по спину?

ВАРИАНТ 2.

A1. Указать правильный вариант написания формулы Сезерленда:

а) $d^2 = d_{\infty}^2 \left[1 + \frac{T}{C}\right]$;

б) $d^2 = d_{\infty}^2 \left[1 + \frac{C}{T}\right]$;

в) $d_{\infty}^2 = d^2 \left[1 + \frac{C}{T}\right]$;

г) $d_{\infty}^2 = d^2 \left[1 + \frac{T}{C}\right]$.

A2. По какому порядку протекает мономолекулярная реакция в газовой фазе при низких давлениях?

а) первый;

б) нулевой;

в) дробный;

г) второй.

A3. Какой вид имеет основное уравнение для полной скорости мономолекулярной реакции в теории Линдемана?

а) $-\frac{d[A]}{dt} = k_{\infty} [A]$;

б) $-\frac{d[A]}{dt} = k_{\infty} [A]^2$;

в) $-\frac{d[A]}{dt} = \frac{k_1 k_3 [A]^2}{k_2 [A] + k_3}$;

г) $-\frac{d[A]}{dt} = \frac{k_1 k_2 k_3 [A]^2}{k_1 k_2 [A] + k_3}$.

A4. По каким формулам можно рассчитать общее число двойных столкновений (Z): а) для молекул разного сорта; б) для идентичных молекул?

A5. Что представляет собой активированный комплекс? Как он образуется?

B1. Чем с точки зрения метода МО, реакции с циклическим активированным комплексом отличаются от других?

B2. Какой вид принимает основное уравнение теории активированного комплекса для мономолекулярной реакции?

ВАРИАНТ 3.

A1. Что из себя представляет d_{∞} в формуле Сезерленда?

а) расстояние между бесконечно удаленными молекулами;

б) диаметр молекулы стремящийся к бесконечности;

в) газокинетический диаметр молекулы при $T \rightarrow \infty$;

г) расстояние между бесконечно удаленными атомами.

A2. По какому порядку протекает мономолекулярная реакция в газовой фазе при высоких давлениях?

а) первый;

б) нулевой;

в) дробный;

г) второй.

A3. Какое из приведенных уравнений является уравнением Аррениуса:

а) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{E}{RT^2} + b$;

б) $k = A e^{-E/RT}$;

в) $k = AT^n e^{-E/RT}$;

г) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{\Delta V^{\ddagger}}{RT^2}$.

A4. Какое приближение используется при расчете поверхности потенциальной энергии реакции? В чем оно состоит?

A5. Что понимается под активным столкновением? Какова доля таких столкновений от их общего количества?

B1. Почему при обычных условиях не протекает реакция димеризации этилена с образованием циклобутана?

B2. Что представляет собой предэкспоненциальный множитель A в уравнении Аррениуса? Дать ответ в терминах теории активных столкновений. От каких факторов он зависит?

ВАРИАНТ 4.

A1. Что называется «эффективным» диаметром столкновений?

а) средняя величина расстояния от данной молекулы до соседней при заданном давлении;

б) сумма радиусов молекул, рассчитанных рентгенографически;

в) наименьшее расстояние между центрами сталкивающихся молекул с учетом взаимодействия между ними;

г) сумма радиусов молекул, определенных методом спектроскопии.

A2. Знание, каких свойств молекул необходимо для расчета числа двойных столкновений?

а) массы молекул и энергия их относительного движения;

б) скорость движения и диаметр молекул;

в) газокинетический диаметр и массы молекул;

г) диаметр молекул и их взаимная ориентация.

A3. A12. Какое уравнение является исходным при выводе экспоненциальной зависимости энергии активации от температуры по Вант-Гоффу:

а) $\frac{d \ln k_c}{dT} = \frac{\Delta U^0}{RT^2}$;

б) $\frac{dT}{dT} = \frac{E}{RT^2} + b$;

в) $\frac{d \ln k_p}{dT} = \frac{\Delta H^0}{RT^2}$;

г) $\frac{d \ln k_1/k_2}{dT} = \frac{\Delta U^0}{RT^2}$.

A4. Какие химические реакции получили название адиабатических?

A5. Какие характерные вопросы возникают при изучении мономолекулярных реакций?

B1. К какому типу относятся следующие элементарные реакции: а) взаимодействие атома водорода с молекулой хлора; б) гидролиз йодистого метила; в) распад бромистого этила на этилен и бромистый водород?

B2. Сформулируйте основные постулаты теории активированного комплекса. Каковы границы применимости этой теории и чем они обусловлены?

ВАРИАНТ 5.

A1. Как связаны между собой E_{on} , экспериментально определяемая по уравнению Аррениуса, и E, входящая в экспоненту уравнения, согласно теории активных столкновений?

а) $E_{on} = E - \frac{1}{2}RT$;

б) $E = E_{on} + RT$;

в) $E = E_{on} - \frac{1}{2}RT$;

г) $E_{on} = E + \frac{3}{2}RT$.

A2. Какое из приведенных уравнений является уравнением Аррениуса:

а) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{E}{RT^2} + b$;

б) $k = A e^{-E/RT}$;

в) $k = AT^n e^{-E/RT}$;

г) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{\Delta V^0}{RT^2}$.

A3. A10. По какому порядку протекает мономолекулярная реакция в газовой фазе при высоких давлениях?

а) первый;

б) нулевой;

в) дробный;

г) второй.

A4. Что такое поверхность потенциальной энергии?

A5. По какому порядку протекает мономолекулярная реакция в газовой фазе при высоких давлениях? При низких?

V1. Получите и проанализируйте выражение для константы скорости бимолекулярной реакции для молекул разного сорта. От каких молекулярных параметров зависит k ?

V2. Как выражается «средняя скорость прохождения комплекса через барьер» через молекулярные параметры комплекса? Зависит ли скорость прохождения комплекса через барьер от высоты барьера?

ВАРИАНТ 6.

A1. Каким образом общее число двойных столкновений (Z) зависит от температуры и давления?

а) Z слабо зависит от температуры и не зависит от давления;

б) Z растет пропорционально $T^{1/2}$ и P^2 ;

в) $Z \sim T^{-1}$ и P^2 ;

г) Z не зависит от T и P .

A2. По какому порядку протекает мономолекулярная реакция в газовой фазе при низких давлениях?

а) первый;

б) нулевой;

в) дробный;

г) второй.

A3. A3. Какое из приведенных уравнений является уравнением Аррениуса:

а) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{E}{RT^2} + b$;

б) $k = A e^{-E/RT}$;

в) $k = AT^n e^{-E/RT}$;

г) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{\Delta U^0}{RT^2}$.

A4. Пояснить термин «эффективный диаметр». Зависит ли эффективный диаметр от температуры?

A5. Как выражается «средняя скорость прохождения комплекса через барьер» через молекулярные параметры комплекса? Зависит ли скорость прохождения комплекса через барьер от высоты барьера?

V1. Каков механизм активации в мономолекулярных газовых реакциях?

V2. В чем заключается правило Вудворда-Хоффмана?

ВАРИАНТ 7.

A1. Какое уравнение является исходным при выводе экспоненциальной зависимости энергии активации от температуры по Вант-Гоффу:

а) $\frac{d \ln K_c}{dT} = \frac{\Delta U^0}{RT^2}$;

б) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{E}{RT^2} + b$;

в) $\frac{d \ln K_p}{dT} = \frac{\Delta H^0}{RT^2}$;

г) $\frac{d \ln^{k_1}/k_2}{dT} = \frac{\Delta U^0}{RT^2}$.

A2. Каков физический смысл множителя множителя $e^{-E/RT}$?

а) характеризует изменение числа молекул при столкновении;

б) равен доле активных молекул, энергия которых $\geq E$;

в) учитывает общее число сталкивающихся молекул;

г) дает число активных молекул, энергия которых $\geq E$.

A3. Каким образом общее число двойных столкновений (Z) зависит от температуры и давления?

а) Z слабо зависит от температуры и не зависит от давления;

б) Z растет пропорционально $T^{1/2}$ и P^2 ;

в) $Z \sim T^{-1}$ и P^2 ;

г) Z не зависит от T и P .

A4. Каков физический смысл множителя $d^2 [8\pi RT \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)]^{1/2}$?

A5. По какому порядку протекает мономолекулярная реакция в газовой фазе при высоких давлениях? При низких?

V1. Дайте определение энергии активации. Как связаны между собой величины энергии активации, опытной и входящей в уравнение теории активных соударений?

V2. В каких реакциях имеют место затруднения, связанные с орбитальной симметрией: с линейным или циклическим активированным комплексом? Каковы примеры реакций разрешенных и запрещенных по спину?

ВАРИАНТ 8.

A1. В теории активных соударений под активными понимаются такие соударения:

- а) в которых энергия каждой молекулы больше энергии активации;
- б) в которых суммарная энергия двух молекул больше или равна энергии активации;
- в) в которых суммарная энергия молекул больше энергии потенциального барьера;
- г) в которых при взаимодействии молекул выделяется энергия.

A2. Какие величины согласно ТАС определяют предэкспоненциальный множитель (A) уравнения Аррениуса?

- а) вероятностный фактор и доля активных молекул;
- б) общее число столкновений и энергия активации;
- в) вероятностный фактор;
- д) больцмановский множитель и диаметр столкновений.

A3. Как связаны между собой $E_{оп}$, экспериментально определяемая по уравнению Аррениуса, и E , входящая в экспоненту уравнения, согласно теории активных столкновений?

- а) $E_{оп} = E - \frac{1}{2}RT$;
- б) $E = E_{оп} + RT$;
- в) $E = E_{оп} - \frac{1}{2}RT$;
- г) $E_{оп} = E + \frac{3}{2}RT$.

A4. Дайте определение энергии активации. Как связаны между собой величины энергии активации, опытной и входящей в уравнение теории активных соударений?

A5. Как может быть отражено развитие элементарного химического акта на поверхности потенциальной энергии?

V1. Каково основное уравнение теории активированного комплекса? Что такое трансмиссионный коэффициент?

V2. К какому типу относятся следующие элементарные реакции: а) взаимодействие атома водорода с молекулой хлора; б) гидролиз йодистого метила; в) распад бромистого этила на этилен и бромистый водород?

ВАРИАНТ 9.

A1. Каков физический смысл стерического фактора P в теории активных столкновений?

- а) P вносит поправку на распределение молекул по энергии;
- б) P – фактор, учитывающий степень измельчения веществ;
- в) P указывает на степень взаимодействия молекул до и после столкновения;
- г) P – вероятность того, что активное столкновение приведет к реакции.

A2. Какое из приведенных уравнений является уравнением Аррениуса:

- а) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{E}{RT^2} + b$;
- б) $k = A e^{-E/RT}$;
- в) $k = AT^n e^{-E/RT}$;
- г) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{\Delta V^0}{RT^2}$.

A3. Каков физический смысл больцмановского множителя $e^{-E/RT}$?

- а) характеризует изменение числа молекул при столкновении;
- б) равен доле активных молекул, энергия которых $\geq E$;
- в) учитывает общее число сталкивающихся молекул;
- г) дает число активных молекул, энергия которых $\geq E$.

A4. Какие реакции называются мономолекулярными? Для каких молекул они характерны?

A5. Как определяются газокинетические диаметры сталкивающихся молекул? Что такое средний диаметр столкновения?

V1. На основании теории активных столкновений показать, каким образом с ростом температуры изменяются величины предэкспоненциального множителя и экспоненты в уравнении для константы скорости бимолекулярной реакции.

V2. Чем с точки зрения метода МО, реакции с циклическим активированным комплексом отличаются от других?

ВАРИАНТ 10.

A1. Как связаны между собой E_{on} , экспериментально определяемая по уравнению Аррениуса, и E , входящая в экспоненту уравнения, согласно теории активных столкновений?

- а) $E_{on} = E - \frac{1}{2}RT$;
- б) $E = E_{on} + RT$;
- в) $E = E_{on} - \frac{1}{2}RT$;
- г) $E_{on} = E + \frac{3}{2}RT$.

A2. Какой вид имеет основное уравнение для полной скорости мономолекулярной реакции в теории Линдемана?

- а) $-\frac{d[A]}{dt} = k_{\infty}[A]$;
- б) $-\frac{d[A]}{dt} = k_{\infty}[A]^2$;
- в) $-\frac{d[A]}{dt} = \frac{k_1 k_3 [A]^2}{k_2 [A] + k_3}$;
- г) $-\frac{d[A]}{dt} = \frac{k_1 k_2 k_3 [A]^2}{k_1 k_2 [A] + k_3}$.

A3. Каков физический смысл стерического фактора P в теории активных столкновений?

- а) P вносит поправку на распределение молекул по энергии;
- б) P – фактор, учитывающий степень измельчения веществ;
- в) P указывает на степень взаимодействия молекул до и после столкновения;
- г) P – вероятность того, что активное столкновение приведет к реакции.

A4. Как рассчитывается вероятность столкновений двух частиц?

A5. Чем объяснить значительные расхождения между величинами предэкспоненциального множителя A в уравнении Аррениуса, вычисленными по опытным данным и рассчитанными по теории активных столкновений?

V1. В чем заключается правило Вудворда-Хоффмана?

V2. Сформулируйте основные постулаты теории активированного комплекса. Каковы границы применимости этой теории и чем они обусловлены?

ВАРИАНТ 11.

A1. Указать правильный вариант написания формулы Сезерленда:

- а) $d^2 = d_{\infty}^2 \left[1 + \frac{T}{T_0}\right]$;
- б) $d^2 = d_{\infty}^2 \left[1 + \frac{c}{T}\right]$;
- в) $d_{\infty}^2 = d^2 \left[1 + \frac{c}{T}\right]$;
- г) $d_{\infty}^2 = d^2 \left[1 + \frac{T}{c}\right]$.

A2. Знание каких свойств молекул необходимо для расчета числа двойных столкновений?

- а) массы молекул и энергия их относительного движения;
- б) скорость движения и диаметр молекул;
- в) газокинетический диаметр и массы молекул;
- г) диаметр молекул и их взаимная ориентация.

A3. Что называется «эффективным» диаметром столкновений?

- а) средняя величина расстояния от данной молекулы до соседней при заданном давлении;
- б) сумма радиусов молекул, рассчитанных рентгенографически;
- в) наименьшее расстояние между центрами сталкивающихся молекул с учетом взаимодействия между ними;
- г) сумма радиусов молекул, определенных методом спектроскопии.

A4. Каков физический смысл энергии активации в теории активных столкновений?

A5. Какие значения принимает стерический фактор P при благоприятной и неблагоприятной ориентации молекул в пространстве?

V1. Получите и проанализируйте выражение для константы скорости k бимолекулярной реакции для молекул разного сорта. От каких параметров зависит k ?

V2. В каких реакциях имеют место затруднения, связанные с орбитальной симметрией: с линейным или циклическим активированным комплексом? Каковы примеры реакций, разрешенных и запрещенных по спину?

ВАРИАНТ 12.

A1. Указать правильный вариант написания формулы Сезерленда:

а) $d^2 = d_{\infty}^2 \left[1 + \frac{T}{T_0}\right]$;

б) $d^2 = d_{\infty}^2 \left[1 + \frac{C}{T}\right]$;

в) $d_{\infty}^2 = d^2 \left[1 + \frac{T}{T_0}\right]$;

г) $d_{\infty}^2 = d^2 \left[1 + \frac{T}{C}\right]$.

A2. По какому порядку протекает мономолекулярная реакция в газовой фазе при низких давлениях?

а) первый;

б) нулевой;

в) дробный;

г) второй.

A3. Какой вид имеет основное уравнение для полной скорости мономолекулярной реакции в теории Линдемана?

а) $-\frac{d[A]}{dt} = k_{\infty} [A]$;

б) $-\frac{d[A]}{dt} = k_{\infty} [A]^2$;

в) $-\frac{d[A]}{dt} = \frac{k_1 k_3 [A]^2}{k_2 [A] + k_3}$;

г) $-\frac{d[A]}{dt} = \frac{k_1 k_2 k_3 [A]^2}{k_1 k_2 [A] + k_3}$.

A4. По каким формулам можно рассчитать общее число двойных столкновений (Z): а) для молекул разного сорта; б) для идентичных молекул?

A5. Что представляет собой активированный комплекс? Как он образуется?

V1. Чем с точки зрения метода МО, реакции с циклическим активированным комплексом отличаются от других?

V2. Какой вид принимает основное уравнение теории активированного комплекса для мономолекулярной реакции?

ВАРИАНТ 13.

A1. Что из себя представляет d_{∞} в формуле Сезерленда?

а) расстояние между бесконечно удаленными молекулами;

б) диаметр молекулы стремящийся к бесконечности;

в) газокинетический диаметр молекулы при $T \rightarrow \infty$;

г) расстояние между бесконечно удаленными атомами.

A2. По какому порядку протекает мономолекулярная реакция в газовой фазе при высоких давлениях?

а) первый;

б) нулевой;

в) дробный;

г) второй.

A3. Какое из приведенных уравнений является уравнением Аррениуса:

а) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{E}{RT^2} + b$;

б) $k = A e^{-E/RT}$;

в) $k = AT^n e^{-E/RT}$;

г) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{\Delta V^{\ddagger}}{RT^2}$.

A4. Какое приближение используется при расчете поверхности потенциальной энергии реакции? В чем оно состоит?

A5. Что понимается под активным столкновением? Какова доля таких столкновений от их общего количества?

V1. Почему при обычных условиях не протекает реакция димеризации этилена с образованием циклобутана?

V2. Что представляет собой предэкспоненциальный множитель A в уравнении Аррениуса? Дать ответ в терминах теории активных столкновений. От каких факторов он зависит?

ВАРИАНТ 14.

A1. Что называется «эффективным» диаметром столкновений?

а) средняя величина расстояния от данной молекулы до соседней при заданном давлении;

б) сумма радиусов молекул, рассчитанных рентгенографически;
в) наименьшее расстояние между центрами сталкивающихся молекул с учетом взаимодействия между ними;

г) сумма радиусов молекул, определенных методом спектроскопии.

A2. Знание, каких свойств молекул необходимо для расчета числа двойных столкновений?

а) массы молекул и энергия их относительного движения;

б) скорость движения и диаметр молекул;

в) газокинетический диаметр и массы молекул;

г) диаметр молекул и их взаимная ориентация.

A3. A12. Какое уравнение является исходным при выводе экспоненциальной зависимости энергии активации от температуры по Вант-Гоффу:

а) $\frac{d \ln k_c}{dT} = \frac{\Delta U^0}{RT^2}$;

б) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{E}{RT^2} + b$;

в) $\frac{d \ln k_p}{dT} = \frac{\Delta H^0}{RT^2}$;

г) $\frac{d \ln k_1/k_2}{dT} = \frac{\Delta U^0}{RT^2}$.

A4. Какие химические реакции получили название адиабатических?

A5. Какие характерные вопросы возникают при изучении мономолекулярных реакций?

V1. К какому типу относятся следующие элементарные реакции: а) взаимодействие атома водорода с молекулой хлора; б) гидролиз йодистого метила; в) распад бромистого этила на этилен и бромистый водород?

V2. Сформулируйте основные постулаты теории активированного комплекса. Каковы границы применимости этой теории и чем они обусловлены?

ВАРИАНТ 15.

A1. Как связаны между собой E_{on} , экспериментально определяемая по уравнению Аррениуса, и E , входящая в экспоненту уравнения, согласно теории активных столкновений?

а) $E_{on} = E - \frac{1}{2}RT$;

б) $E = E_{on} + RT$;

в) $E = E_{on} - \frac{1}{2}RT$;

г) $E_{on} = E + \frac{3}{2}RT$.

A2. Какое из приведенных уравнений является уравнением Аррениуса:

а) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{E}{RT^2} + b$;

б) $k = A e^{-E/RT}$;

в) $k = AT^n e^{-E/RT}$;

г) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{\Delta V^0}{RT^2}$.

A3. По какому порядку протекает мономолекулярная реакция в газовой фазе при высоких давлениях?

а) первый;

б) нулевой;

в) дробный;

г) второй.

A4. Что такое поверхность потенциальной энергии?

A5. По какому порядку протекает мономолекулярная реакция в газовой фазе при высоких давлениях? При низких?

V1. Получите и проанализируйте выражение для константы скорости бимолекулярной реакции для молекул разного сорта. От каких молекулярных параметров зависит k ?

V2. Как выражается «средняя скорость прохождения комплекса через барьер» через молекулярные параметры комплекса? Зависит ли скорость прохождения комплекса через барьер от высоты барьера?

ВАРИАНТ 16.

A1. Каким образом общее число двойных столкновений (Z) зависит от температуры и давления?

а) Z слабо зависит от температуры и не зависит от давления;

- б) Z растёт пропорционально $T^{1/2}$ и P^2 ;
 в) $Z \sim T^{-1}$ и P^2 ;
 г) Z не зависит от T и P .

A2. По какому порядку протекает мономолекулярная реакция в газовой фазе при низких давлениях?

- а) первый;
 б) нулевой;
 в) дробный;
 г) второй.

A3. А3. Какое из приведенных уравнений является уравнением Аррениуса:

- а) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{E}{RT^2} + b$;
 б) $k = A e^{-E/RT}$;
 в) $k = AT^n e^{-E/RT}$;
 г) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{\Delta V^0}{RT^2}$.

A4. Пояснить термин «эффективный диаметр». Зависит ли эффективный диаметр от температуры?

A5. Как выражается «средняя скорость прохождения комплекса через барьер» через молекулярные параметры комплекса? Зависит ли скорость прохождения комплекса через барьер от высоты барьера?

V1. Каков механизм активации в мономолекулярных газовых реакциях?

V2. В чем заключается правило Вудворда-Хоффмана?

ВАРИАНТ 17.

A1. Какое уравнение является исходным при выводе экспоненциальной зависимости энергии активации от температуры по Вант-Гоффу:

- а) $\frac{d \ln k_c}{dT} = \frac{\Delta U^0}{RT^2}$;
 б) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{E}{RT^2} + b$;
 в) $\frac{d \ln k_p}{dT} = \frac{\Delta H^0}{RT^2}$;
 г) $\frac{d \ln k_1/k_2}{dT} = \frac{\Delta U^0}{RT^2}$.

A2. Каков физический смысл множителя Больцмановского множителя $e^{-E/RT}$?

- а) характеризует изменение числа молекул при столкновении;
 б) равен доле активных молекул, энергия которых $\geq E$;
 в) учитывает общее число сталкивающихся молекул;
 г) даёт число активных молекул, энергия которых $\geq E$.

A3. Каким образом общее число двойных столкновений (Z) зависит от температуры и давления?

- а) Z слабо зависит от температуры и не зависит от давления;
 б) Z растёт пропорционально $T^{1/2}$ и P^2 ;
 в) $Z \sim T^{-1}$ и P^2 ;
 г) Z не зависит от T и P .

A4. Каков физический смысл множителя $d^2 [8\pi RT (\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2})]^{1/2}$?

A5. По какому порядку протекает мономолекулярная реакция в газовой фазе при высоких давлениях? При низких?

V1. Дайте определение энергии активации. Как связаны между собой величины энергии активации, опытной и входящей в уравнение теории активных соударений?

V2. В каких реакциях имеют место затруднения, связанные с орбитальной симметрией: с линейным или циклическим активированным комплексом? Каковы примеры реакций разрешенных и запрещенных по спину?

ВАРИАНТ 18.

A1. В теории активных соударений под активными понимаются такие соударения:

- а) в которых энергия каждой молекулы больше энергии активации;
 б) в которых суммарная энергия двух молекул больше или равна энергии активации;
 в) в которых суммарная энергия молекул больше энергии потенциального барьера;
 г) в которых при взаимодействии молекул выделяется энергия.

A2. Какие величины согласно ТАС определяют предэкспоненциальный множитель (A) уравнения Аррениуса?

- а) вероятностный фактор и доля активных молекул;
- б) общее число столкновений и энергия активации;
- в) вероятностный фактор;
- д) больцмановский множитель и диаметр столкновений.

A3. Как связаны между собой $E_{он}$, экспериментально определяемая по уравнению Аррениуса, и E , входящая в экспоненту уравнения, согласно теории активных столкновений?

- а) $E_{он} = E - \frac{1}{2}RT$;
- б) $E = E_{он} + RT$;
- в) $E = E_{он} - \frac{1}{2}RT$;
- г) $E_{он} = E + \frac{3}{2}RT$.

A4. Дайте определение энергии активации. Как связаны между собой величины энергии активации, опытной и входящей в уравнение теории активных соударений?

A5. Как может быть отражено развитие элементарного химического акта на поверхности потенциальной энергии?

B1. Каково основное уравнение теории активированного комплекса? Что такое трансмиссионный коэффициент?

B2. К какому типу относятся следующие элементарные реакции: а) взаимодействие атома водорода с молекулой хлора; б) гидролиз йодистого метила; в) распад бромистого этила на этилен и бромистый водород?

ВАРИАНТ 19.

A1. Каков физический смысл стерического фактора P в теории активных столкновений?

- а) P вносит поправку на распределение молекул по энергии;
- б) P – фактор, учитывающий степень измельчения веществ;
- в) P указывает на степень взаимодействия молекул до и после столкновения;
- г) P – вероятность того, что активное столкновение приведет к реакции.

A2. Какое из приведенных уравнений является уравнением Аррениуса:

- а) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{E}{RT^2} + b$;
- б) $k = A e^{-E/RT}$;
- в) $k = AT^n e^{-E/RT}$;
- г) $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{\Delta V^0}{RT^2}$.

A3. Каков физический смысл больцмановского множителя $e^{-E/RT}$?

- а) характеризует изменение числа молекул при столкновении;
- б) равен доле активных молекул, энергия которых $\geq E$;
- в) учитывает общее число сталкивающихся молекул;
- г) дает число активных молекул, энергия которых $\geq E$.

A4. Какие реакции называются мономолекулярными? Для каких молекул они характерны?

A5. Как определяются газокинетические диаметры сталкивающихся молекул? Что такое средний диаметр столкновения?

B1. На основании теории активных столкновений показать, каким образом с ростом температуры изменяются величины предэкспоненциального множителя и экспоненты в уравнении для константы скорости бимолекулярной реакции.

B2. Чем с точки зрения метода МО, реакции с циклическим активированным комплексом отличаются от других?

ВАРИАНТ 20.

A1. Как связаны между собой $E_{он}$, экспериментально определяемая по уравнению Аррениуса, и E , входящая в экспоненту уравнения, согласно теории активных столкновений?

- а) $E_{он} = E - \frac{1}{2}RT$;
- б) $E = E_{он} + RT$;
- в) $E = E_{он} - \frac{1}{2}RT$;
- г) $E_{он} = E + \frac{3}{2}RT$.

A2. Какой вид имеет основное уравнение для полной скорости мономолекулярной реакции в теории Линдемана?

- а) $-\frac{d[A]}{dt} = k_{\infty} [A]$;
 б) $-\frac{d[A]}{dt} = k_{\infty} [A]^2$;
 в) $-\frac{d[A]}{dt} = \frac{k_1 k_3 [A]^2}{k_2 [A] + k_3}$;
 г) $-\frac{d[A]}{dt} = \frac{k_1 k_2 k_3 [A]^2}{k_1 k_2 [A] + k_3}$.

A3. Каков физический смысл стерического фактора P в теории активных столкновений?

- а) P вносит поправку на распределение молекул по энергии;
 б) P – фактор, учитывающий степень измельчения веществ;
 в) P указывает на степень взаимодействия молекул до и после столкновения;
 г) P – вероятность того, что активное столкновение приведет к реакции.

A4. Как рассчитывается вероятность столкновений двух частиц?

A5. Чем объяснить значительные расхождения между величинами предэкспоненциального множителя A в уравнении Аррениуса, вычисленными по опытным данным и рассчитанными по теории активных столкновений?

V1. В чем заключается правило Вудворда-Хоффмана?

V2. Сформулируйте основные постулаты теории активированного комплекса. Каковы границы применимости этой теории и чем они обусловлены?

ВАРИАНТ 21.

A1. Указать правильный вариант написания формулы Сезерленда:

- а) $d^2 = d_{\infty}^2 \left[1 + \frac{T}{C}\right]$;
 б) $d^2 = d_{\infty}^2 \left[1 + \frac{C}{T}\right]$;
 в) $d_{\infty}^2 = d^2 \left[1 + \frac{C}{T}\right]$;
 г) $d_{\infty}^2 = d^2 \left[1 + \frac{T}{C}\right]$.

A2. Знание каких свойств молекул необходимо для расчета числа двойных столкновений?

- а) массы молекул и энергия их относительного движения;
 б) скорость движения и диаметр молекул;
 в) газокинетический диаметр и массы молекул;
 г) диаметр молекул и их взаимная ориентация.

A3. Что называется «эффективным» диаметром столкновений?

- а) средняя величина расстояния от данной молекулы до соседней при заданном давлении;
 б) сумма радиусов молекул, рассчитанных рентгенографически;
 в) наименьшее расстояние между центрами сталкивающихся молекул с учетом взаимодействия между ними;
 г) сумма радиусов молекул, определенных методом спектроскопии.

A4. Каков физический смысл энергии активации в теории активных столкновений?

A5. Какие значения принимает стерический фактор P при благоприятной и неблагоприятной ориентации молекул в пространстве?

V1. Получите и проанализируйте выражение для константы скорости k бимолекулярной реакции для молекул разного сорта. От каких параметров зависит k ?

V2. В каких реакциях имеют место затруднения, связанные с орбитальной симметрией: с линейным или циклическим активированным комплексом? Каковы примеры реакций, разрешенных и запрещенных по спину?

ВАРИАНТ 22.

A1. Каким образом общее число двойных столкновений (Z) зависит от температуры и давления?

- а) Z слабо зависит от температуры и не зависит от давления;
 б) Z растет пропорционально $T^{1/2}$ и P^2 ;
 в) $Z \sim T^{-1}$ и P^2 ;
 г) Z не зависит от T и P.

A2. Какой вид имеет основное уравнение для полной скорости мономолекулярной реакции в теории Линдемана?

- а) $-\frac{d[A]}{dt} = k_{\infty} [A]$;
 б) $-\frac{d[A]}{dt} = k_{\infty} [A]^2$;

$$\text{в) } -\frac{d[A]}{dt} = \frac{k_1 k_3 [A]^2}{k_2 [A] + k_3};$$

$$\text{г) } -\frac{d[A]}{dt} = \frac{k_1 k_2 k_3 [A]^2}{k_1 k_2 [A] + k_3}.$$

A3. Что из себя представляет d_{∞} в формуле Сезерленда?

- а) расстояние между бесконечно удаленными молекулами;
- б) диаметр молекулы стремящийся к бесконечности;
- в) газокинетический диаметр молекулы при $T \rightarrow \infty$;
- г) расстояние между бесконечно удаленными атомами.

A4. Что означает термин путь реакции, координата реакции?

A5. Чем вызвана необходимость введения понятия «реакционный центр активированного комплекса»? Что такое реакционный центр?

V1. Получите и проанализируйте выражение для константы скорости k бимолекулярной реакции для молекул разного сорта. От каких параметров зависит k ?

V2. В каких реакциях имеют место затруднения, связанные с орбитальной симметрией: с линейным или циклическим активированным комплексом? Каковы примеры реакций, разрешенных и запрещенных по спину?

Описание технологии проведения

Для выполнения теста в письменном виде отводится 90 минут, примерные тестовые задания приведены в учебных пособиях (пункт 16) и предлагаются студентам для подготовки заранее. Задания под номерами А1-А5 оцениваются в 1 балл, задания V1-V2 оцениваются в 2 балла, задание С1 в тесте № 1 оценивается в 4 балла. Тест считается успешно выполненным в случае набора студентом более 50% от максимально возможного балла за тест.

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Собеседование по билетам к зачету,

При наборе студентами при выполнении ВСЕХ! тестов более 50% максимально возможного числа баллов студентам может быть выставлен зачет автоматом.

Перечень вопросов к зачету и порядок формирования КИМ

1. Методы определения порядка реакций.
2. Особенности реакций в открытых системах.
3. Принципы и виды классификаций химических реакций.
4. Макрокинетика гетерогенных реакций. Диффузионные модели.
5. Особенности кинетического описания гетерогенных реакций. Основные типы гетерогенных реакций.
6. Методы исследования кинетики реакций.
7. Модельные реакции в закрытых системах.
8. Теории кинетики гетерогенных реакций. Модели зародышеобразования.
9. Элементарные стадии и элементарный акт химической реакции. Реакционное пространство.
10. Кинетическое описание сложного химического процесса (на примере реакции хлорирования этилена).
11. Специфика исследования кинетики гетерогенных реакций. Степень превращения.
12. Теория активных соударений и ее применение для бимолекулярных реакций.
13. Формальная кинетика последовательных реакций. График Раковского.
14. Вывод основного уравнения теории активных соударений теории активированного комплекса.
15. Механизм реакции и принцип независимости элементарных стадий.

16. Активация в би- и мономолекулярных реакциях. Схема Линдемана.
17. Скорость химических реакций. Мгновенная и средняя скорость. Графическая интерпретация.
18. Квазиравновесное и квазистационарное приближение и их роль в кинетике сложных реакций.
19. Кинетическое уравнение химического процесса и уравнения кинетических кривых.
20. Прямая и обратная задачи в кинетике простых и сложных реакций.
21. Кинетическое описание односторонних реакций 1, 2 и т.д. порядков.
22. Кинетическое описание параллельных реакций.
23. Особенности кинетического описания гетерогенных реакций. Основные типы.
24. Основной постулат химической кинетики. Константа скорости реакции и ее зависимость от температуры. Уравнение Аррениуса.

Каждый КИМ содержит 2 вопроса из разных разделов программы и одну практико-ориентированную задачу.

Перечень практико-ориентированных задач:

1 При изучении реакции разложения ацетона в газовой фазе были получены следующие экспериментальные данные: $P_{\text{нач}} = 300$ Торр, $T_{1/2} = 23,96$ мин и $P_{\text{нач}} = 500$ Торр, $T_{1/2} = 24$ мин. Определите порядок реакции и константу скорости.

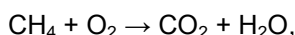
2. Для элементарной газовой реакции $\text{H}_2 + \text{Ar} = 2\text{H} + \text{Ar}$ значение константы скорости при 3000 К равно $2,2 \cdot 10^4$ л·моль⁻¹·с⁻¹. Определите скорость этой реакции, если известны концентрации $[\text{H}_2] = 4,1 \cdot 10^{-3}$ М и $[\text{Ar}] = 4,1 \cdot 10^{-4}$ М. При каком значении концентрации аргона скорость реакции увеличивается вдвое?

3. Для газовой реакции разложения NO при 1030 К получены экспериментальные результаты по зависимости времени полупревращения от начального давления оксида азота:

$P_{\text{нач}}$, Торр	360	290	139	52,5
$T_{1/2}$, с	212	255	470	860

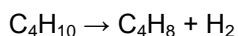
Определите порядок реакции и найдите значение константы скорости.

4. В реакции окисления метана



протекающей с постоянной скоростью в течение 5 мин в сосуде объемом 0,5 литра при 500°C образуется $5 \cdot 10^4$ молей воды, которая удаляется из зоны реакции вымораживанием. Рассчитайте скорость изменения давления в Па/мин.

5. За реакцией разложения бутана



следили по изменению объема газов, занимаемому ими при давлении $1,01 \cdot 10^5$ Па и 20°C. Вычислите, через какое время после начала реакции изменение объема будет равно 10 см³. Скорость реакции постоянна и равна 13,3 Па/с, объем реакционного сосуда – 200 см³, температура – 527°C.

6. За кинетикой реакции диазотирования 2-аминопиридина азотной кислотой следили по зависимости концентрации продукта реакции C от времени:

Время, мин	26	42	52	62	72	114
$[C] \cdot 10^4$, моль/л	37,2	49,8	56,0	61,0	66,9	82,7

Определите величину константы скорости реакции, если с одной молекулой 2-аминопиридина реагируют две молекулы азотной кислоты. Начальные концентрации 2-аминопиридина и азотной кислоты составляют $1,25 \cdot 10^{-2}$ и $3,125 \cdot 10^{-2}$ моль/л соответственно.

7. При исследовании кинетики реакции фторзамещенной N-метилпиридиниевой соли с ионами OH^- была получена следующая зависимость процента превращения соли от времени:

Время, с	2,5	3,9	5,6	7,2	9,3	11,7	14,4	20,6
Превращение, %	17,8	26,6	35,4	42,4	49,6	55,9	61,7	71,6

Определите величину константы скорости реакции, если с одной молекулой соли реагируют два иона OH^- , а начальные концентрации соли и ионов OH^- равны $9,8 \cdot 10^{-5}$ и $3 \cdot 10^{-4}$ моль/л соответственно.

8. При изучении зависимости начальной скорости распада ацетальдегида от давления были получены следующие данные:

$P_0 \cdot 10^{-4}$, Па	0,88	1,08	1,60	2,93	3,49	5,05
W_0 , Па/мин	110	151	263	700	810	1397

Определите порядок реакции и величину константы скорости.

9. При изучении кинетики реакции диоксида азота NO_2 с этиленом C_2H_4 были получены следующие значения начальной скорости в зависимости от исходной концентрации реагирующих веществ:

$[\text{NO}_2] \cdot 10^{-3}$, Па	7,82	7,97	7,81	2,61	10,61
$[\text{C}_2\text{H}_4] \cdot 10^{-3}$, Па	7,57	2,83	14,08	7,84	7,98
W_0 , Па/мин	1066	453	1893	127	1333

Определите порядок реакции и величину константы скорости.

10. В процессе *цис-транс* превращения дихлорэтана измерялось изменение процентного содержания *транс*-изомера со временем. Определите порядок реакции и вычислите константу скорости из приведенных ниже данных:

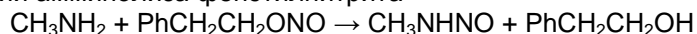
Время, часы	0	0,5	1,0	2,0	3,0	4,0	5,0	6,0
Содержание <i>транс</i> -изомера, %	0	8	15	29	40	50	57	64

11. При щелочном гидролизе аллилхлорида в 50%-м водном спирте были получены следующие результаты:

Время, часы	0	6,6	19,0	26,2	42,8	66,9
$[\text{C}_3\text{H}_5\text{Cl}]$, моль/л	0,1214	0,1148	0,1064	0,1020	0,0945	0,0871
$[\text{OH}^-]$, моль/л	0,0515	0,0449	0,0365	0,0321	0,0246	0,0175

Определите порядок и вычислите константу скорости реакции из приведенных выше экспериментальных данных.

12. Кинетика реакции амминолиза фенэтилнитрита



исследовалась методом отбора проб. Ниже приведена зависимость количества 0,05 н. раствора HCl , пошедшего на титрование пробы реакционной смеси (5 мл), от времени:

Время, мин	0	300	420	545	1305	∞
Количество HCl , мл	8,14	7,33	7,11	6,90	5,74	2,21

Найдите из этих данных величину константы скорости реакции

13. При изучении кинетики распада диэтилперекиси получены следующие значения величин констант скорости реакции при различных температурах:

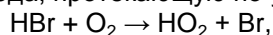
Температура, $^{\circ}\text{C}$	140,0	147,8	156,5	184,5
$k \cdot 10^4$, c^{-1}	1,75	3,6	6,67	78,8

Рассчитайте энергию активации и предэкспоненциальный множитель.

14. Вычислите энергию активации и предэкспоненциальный множитель для реакции на основании следующих данных об изменении констант скорости с изменением температуры:

Температура, $^{\circ}\text{C}$	356	427	508
k , c^{-1}	0,0295	1,15	39,6

15. Реакцию окисления бромоводорода, протекающую по уравнению



исследовали при различных температурах. При этом была получена следующая зависимость константы скорости реакции от температуры:

Температура, К	700	762	800
k , $\text{cm}^3/(\text{моль} \cdot \text{c})$	5,1	46,2	151

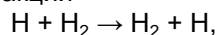
Рассчитайте энергию активации и предэкспоненциальный множитель.

17. Определите энергию активации и предэкспоненциальный множитель реакции из следующей зависимости времен полупревращения от температуры:

Температура, $^{\circ}\text{C}$	529,5	538,5	550,5	560,0
$T_{1/2}$, с	66,5	44,3	29,6	14,6

Начальное давление равно 200 Па, порядок реакции – 3/2.

18. Чему равен стерический фактор реакции



если константа скорости этой реакции при 27 °С равна $7,3 \cdot 10^7 \text{ см}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$, а энергия активации – 34,3 кДж/моль? Величины газокинетических сечений для атомов и молекул водорода равны $1,35 \cdot 10^{-8}$ и $2,7 \cdot 10^{-8}$ см соответственно.

19. В условиях ацетоллиза тетраацетата β ,D-глюкопиранозида (A) наряду с пентаацетатом D-глюкопиранозы (B) образуется также некоторое количество побочного продукта C. Рассчитайте величины констант скоростей соответствующих реакций из приведенных ниже зависимостей концентраций веществ A и C от времени:

Время, мин	0	10	20	30	90	120
[A], усл.ед.	1	0,921	0,845	0,782	0,465	0,323
[C], усл.ед.	0	0,006	0,012	0,021	0,036	0,06

Описание технологии проведения

На подготовку письменного ответа на задания КИМ (на листах ответов) даётся 60 минут, после этого проводится устная беседа.

Требования к выполнению заданий, шкалы и критерии оценивания

Для оценивания результатов обучения на зачете используются следующие показатели:

- 1) знание основных понятий и законов химической кинетики, особенностей кинетического описания реакций в конденсированной фазе, моделей зародышеобразования и диффузионных моделей в кинетике топохимических реакций;
- 2) знание основных механизмов гомогенного катализа и характерных черт гетерогенных каталитических реакций;
- 3) умение определять порядок и константу скорости реакции, период полупревращения на основе экспериментальных данных о свойствах системы;
- 4) умение использовать теоретические знания для решения конкретных задач химической кинетики, устанавливать взаимосвязь между кинетическими данными и механизмом реакции;
- 5) владение способностью иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований.

Для оценивания результатов обучения на зачете используется 2-балльная шкала: «зачтено», «незачтено».

Соотношение показателей, критериев и шкалы оценивания результатов обучения.

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Обучающийся в полной мере владеет понятийным аппаратом и знанием законов химической кинетики, способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, применять теоретические знания для решения практических задач в области кинетики и катализа. Может допускать отдельные ошибки при определении порядка реакции, константы скорости, периода полупревращения, интерпретации механизмов гетерогенных и каталитических реакций, не умеет применять теоретические знания для интерпретации конкретных кинетических данных.	Повышенный уровень	зачтено
Обучающийся владеет понятийным аппаратом и законами химической кинетики, способен использовать знания для интерпретации кинетических данных конкретных реакций, допускает отдельные ошибки при определении порядка реакции,	Базовый уровень	зачтено

константы скорости, периода полупревращения, интерпретации механизмов гетерогенных и каталитических реакций.		
Обучающийся владеет частично теоретическими основами дисциплины, фрагментарно способен раскрыть законы и теории химической кинетики и катализа, не всегда умеет применять теоретические знания для интерпретации конкретных кинетических данных.	Пороговый уровень	зачтено
Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допускает грубые ошибки.	–	Незачтено

При наборе студентами при выполнении ВСЕХ! тестов более 50% максимально возможного числа баллов студентам может быть выставлен зачет автоматом.

20.3 Фонд оценочных средств сформированности компетенций студентов, рекомендуемый для проверки остаточных знаний при проведении диагностических работ:

ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники

Задания закрытого типа

$$t = \frac{\ln 2}{k}$$

1. Выражение является выражением для определения:

- времени полупревращения для односторонних реакций первого порядка;
- времени полупревращения для односторонних реакций второго порядка;
- времени полупревращения для односторонних реакций n-го порядка;
- времени полупревращения для односторонних реакций третьего порядка.

2. Что является определением кинетической кривой

- кривая, изображающая изменение натурального логарифма от времени;
- кривая, изображающая изменение десятичного логарифма концентрации от времени;
- кривая, изображающая изменение концентрации какого-либо компонента от времени;
- кривая, изображающая изменение скорости реакции от времени.

3. Каким образом общее число двойных столкновений (Z) зависит от температуры и давления?

а) Z слабо зависит от температуры и не зависит от давления;

б) Z растет пропорционально $T^{1/2}$ и P^2 ;

в) $Z \sim T^{-1}$ и P^2 ;

г) Z не зависит от T и P.

4. Какой вид имеет основное уравнение для полной скорости мономолекулярной реакции в теории Линдемана?

а) $-\frac{d[A]}{dt} = k_{\infty} [A]$;

б) $-\frac{d[A]}{dt} = k_{\infty} [A]^2$;

в) $-\frac{d[A]}{dt} = \frac{k_1 k_3 [A]^2}{k_2 [A] + k_3}$;

$$-\frac{d[A]}{dt} = \frac{k_1 k_2 k_3 [A]^2}{k_1 k_2 [A] + k_3}$$

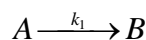
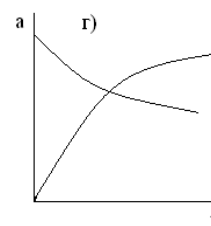
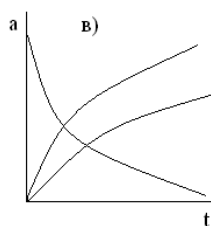
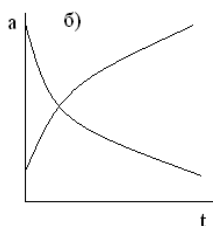
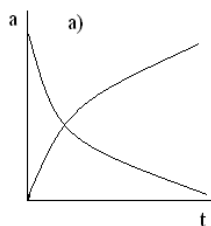
г)

5. Что из себя представляет d_∞ в формуле Сезерленда?

- а) расстояние между бесконечно удаленными молекулами;
- б) диаметр молекулы стремящийся к бесконечности;
- в) газокинетический диаметр молекулы при $T \rightarrow \infty$;
- г) расстояние между бесконечно удаленными атомами.

6. На каком из рисунков представлены кинетические кривые для А и В в обратимой

реакции первого порядка $A \leftrightarrow B$ ($b=0$)?



7. Как связаны концентрации веществ В и С в реакции $A \xrightarrow{k_2} C + D$?

- а) $[B]:([C]+[D])=k_1:k_2$;
- б) $[B]:[D/2]=k_1:k_2$;
- в) $[B]:[D]=k_2:k_1$;
- г) $[B]:[D]=k_1:k_2$.

Задания с развернутым ответом

1. Может ли порядок реакции быть нулевым, дробным, отрицательным?
2. Основной постулат химической кинетики. Физический смысл константы скорости реакции.
3. Сформулировать принцип независимости элементарных стадий, следствие, вытекающее из него и его математическую формулировку.
4. Запишите выражение для скорости реакции $N_2 + 3H_2 = 2NH_3$ по компонентам.
5. Для реакции первого порядка получить дифференциальное и интегральное уравнение зависимости концентрации от времени. Найти время полупревращения.
6. Что означает термин путь реакции, координата реакции?
7. Чем вызвана необходимость введения понятия «реакционный центр активированного комплекса»? Что такое реакционный центр?
8. Получите и проанализируйте выражение для константы скорости k бимолекулярной реакции для молекул разного сорта. От каких параметров зависит k ?
9. В каких реакциях имеют место затруднения, связанные с орбитальной симметрией: с линейным или циклическим активированным комплексом? Каковы примеры реакций, разрешенных и запрещенных по спину?
10. Какие реакции называются сложными? Какова их классификация?
11. Что такое стехиометрическая матрица?
12. Получите уравнение кинетических кривых для последовательности реакций первого порядка.
13. Как связаны между собой время достижения максимальной концентрации промежуточного вещества и время, соответствующее точке перегиба на кривой изменения концентрации продукта со временем?

Критерии и шкалы оценивания:

Для оценивания выполнения заданий используется балльная шкала:

1) закрытые задания (тестовые, средний уровень сложности):

- 1 балл – указан верный ответ;
- 0 баллов – указан неверный ответ, в том числе частично.

2) открытые задания (тестовые, повышенный уровень сложности):

- 2 балла – указан верный ответ;
- 0 баллов – указан неверный ответ, в том числе частично.

3) открытые задания (мини-кейсы, средний уровень сложности):

- 5 баллов – задание выполнено верно (получен правильный ответ, обоснован (аргументирован) ход выполнения (при необходимости));
- 2 балла – выполнение задания содержит незначительные ошибки, но приведен правильный ход рассуждений, или получен верный ответ, но отсутствует обоснование хода его выполнения (если оно было необходимым), или задание выполнено не полностью, но получены промежуточные (частичные) результаты, отражающие правильность хода выполнения задания, или, в случае если задание состоит из выполнения нескольких подзаданий, 50% которых выполнено верно;
- 0 баллов – задание не выполнено или выполнено неверно (ход выполнения ошибочен или содержит грубые ошибки, значительно влияющие на дальнейшее его изучение).