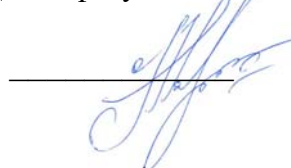


МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова

Институт фундаментальной и прикладной химии

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета биологии и экологии



О.А. Маракаев
«19» мая 2023 г.

Рабочая программа
«Термодинамика и кинетика химических и биохимических процессов»

Направление подготовки
04.04.01 Химия

Направленность (профиль)
«Физико-органическая и фармацевтическая химия»

Форма обучения
очная

Программа одобрена
на заседании института
протокол № 7 от «17» апреля 2023 года

Программа одобрена
НМК факультета биологии и экологии
протокол № 8 от «28» апреля 2023 года

Ярославль

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование у студентов системы знаний об энергетике и возможности осуществления химических процессов, закономерностях их протекания во времени, методах и приемах установления механизма химических реакций и связи строения с реакционной способностью реагирующих частиц; приобретение навыков экспериментального исследования кинетики химических и биохимических процессов.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к части, формируемой участниками образовательных отношений блока 1, является дисциплиной по выбору (Б1.В.ДВ.03.01). По содержанию и методически дисциплина связана с дисциплиной «Кинетика и механизм гомолитических жидкофазных реакций».

Требования к входящим знаниям:

- знание основ физической химии и органической химии; высшей математики.
- владение современными физико-химическими методами исследования.

Знания, полученные при изучении дисциплины, используются при подготовке магистерской диссертации и в дальнейшей научно-исследовательской работе.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих элементов компетенций в соответствии с ФГОС ВО, ОП ВО и приобретения следующих знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности:

Формируемая компетенция (код и формулировка)	Индикатор достижения компетенции (код и формулировка)	Перечень планируемых результатов обучения
Профессиональные компетенции		
ПК-5-н Способен выдвигать концепции направленной структурной модификации соединения-лидера в зависимости от наличия информации о его молекулярной мишени действия в организме.	ПК-5-н.3 Применяет методы математической химии (компьютерное молекулярное моделирование и QSAR) для решения задач, связанных с прогнозированием возможности взаимодействия химических соединений с биологической мишенью.	Знать: – теоретические основы химической термодинамики и кинетики. Уметь: – осуществлять расчет химического равновесия, термодинамики связывания соединения-лидера с молекулярной мишенью, кинетики ферментативного катализа. Владеть: – навыками проведения кинетического компьютерного моделирования и анализа его результатов.
ПК-7-н Способен использовать теоретические представления химии для анализа механизмов химических реакций и реакционной способности органических соединений.	ПК-7-н.1 Выбирает методы исследования закономерностей и механизмов химических процессов, интерпретирует и анализирует полученные результаты.	Знать: – основные закономерности связи между скоростью химической реакции и условиями ее проведения. Уметь: – вычислять по экспериментальным данным константы скорости, энергии активации и предэкспоненциальные множители химических реакций. Владеть: – основными методами экспериментального исследования термодинамики и кинетики химических процессов.

	ПК-7-н.2 Проводит анализ связи строения с реакционной способностью органических соединений, выявляет корреляции «структура – реакционная способность».	Знать: – основные концепции связи строения с реакционной способностью. Уметь: – проводить корреляционный анализ реакционной способности органических соединений. Владеть: – навыками обработки и анализа экспериментальных кинетических данных.
--	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

4. Объем, структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных единиц, 180 акад.ч.

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)						Формы текущего контроля успеваемости Форма промежуточной аттестации (по семестрам) Формы ЭО и ДОТ (при наличии)
			Контактная работа						
			лекции	практические	лабораторные	консультации	аттестационные испытания	самостоятельная работа	
1	Термодинамика химических и биохимических процессов	3	8		8	1		45	Опрос, решение задач, отчеты по лабораторным работам, контрольная работа №1
2	Кинетика химических и биохимических процессов	3	10		10	2		60	Опрос, решение задач, отчеты по лабораторным работам, контрольная работа №2
					2	0,5		33,5	Экзамен
	ИТОГО		18		18	5	0,5	138,5	

4.1 Информация о реализации дисциплины в форме практической подготовки

Информация о разделах дисциплины и видах учебных занятий, реализуемых в форме практической подготовки

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)						Место проведения занятий в форме практической подготовки
			Контактная работа						
			лекции	практические	лабораторные	консультации	аттестационные испытания	самостоятельная работа	
1	Термодинамика химических и биохимических процессов	3			8				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
2	Кинетика химических и биохимических процессов	3			10				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
	ИТОГО				18				

Содержание разделов дисциплины

1. Термодинамика химических и биохимических процессов.

1.1. Виды термодинамических систем. Типы термодинамических процессов. Первое начало термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия. Термохимия. Закон Гесса и следствие из него. Применимость первого начала термодинамики к биологическим процессам.

1.2. Второе начало термодинамики. Термодинамическая вероятность. Статистическая природа второго начала. Характеристические функции. Изолированные системы. Энтропия. Связь энтропии с термодинамической вероятностью. Применимость второго начала к биологическим системам.

1.3. Неизолированные системы. Свободная энергия Гельмгольца и свободная энергия Гиббса. Максимально полезная работа. Уравнение Гиббса-Гельмгольца. Химическое равновесие.

1.4. Стационарное состояние и термодинамическое равновесие. Термодинамический критерий стационарного состояния. Теорема Пригожина. Парадокс Максвелла. Потoki и их взаимодействие вблизи термодинамического равновесия. Соотношение взаимности Онсагера. Биологическое значение сопряжения потоков. Классификация видов энергии по Бриллюэну. Диссипативная функция. Диссипативные структуры. Реакция Белоусова-Жаботинского.

2. Кинетика химических и биохимических процессов.

2.1. Кинетика химических реакций. Задачи химической кинетики. Скорость химической реакции. Закон действия масс. Константа скорости, порядок, молекулярность. Простые реакции. Кинетические уравнения реакций первого-третьего порядка. Методы определения порядка реакции.

2.2. Кинетика сложных реакций. Параллельные, обратимые и последовательные реакции. Кинетика сопряженных реакций. Расчет кинетики сложных реакций по методу квазистационарных концентраций Боденштейна-Семенова. Цепные реакции. Общая

характеристика и кинетические особенности неразветвленных цепных реакций. Разветвленные цепные реакции. Цепные реакции в жизнедеятельности организма.

2.3. Влияние температуры на скорость реакции. Правило Вант-Гоффа. Уравнение Аррениуса. Энергия активации. Теория активных соударений. Модель элементарного акта взаимодействия. Стерический фактор. Теория переходного состояния. Поверхность потенциальной энергии. Расчет константы скорости по теории переходного состояния. Физический смысл предэкспоненциального множителя.

2.4 Кинетика гетерогенных процессов. Кинетическая и диффузионная области. Законы Фика. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных процессов.

2.5. Кинетика гомогенно-каталитических процессов. Кислотно-основной катализ. Кинетика ферментативных процессов. Уравнение Михаэлиса-Ментен. Константа Михаэлиса. Изменение энергии и энтропии активации в ферментативной реакции. Механизмы ферментативного катализа. Электронно-релаксационные взаимодействия в ферментативном катализе.

5. Образовательные технологии, в том числе технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

В процессе обучения используются следующие образовательные технологии:

Вводная лекция – дает первое целостное представление о дисциплине и ориентирует студента в системе изучения данной дисциплины. Студенты знакомятся с назначением и задачами курса, его ролью и местом в системе учебных дисциплин и в системе подготовки в целом. Дается краткий обзор курса, история развития науки и практики, достижения в этой сфере, имена известных ученых, излагаются перспективные направления исследований. На этой лекции высказываются методические и организационные особенности работы в рамках данной дисциплины, а также дается анализ рекомендуемой учебно-методической литературы.

Академическая лекция (или лекция общего курса) – последовательное изложение материала, осуществляемое преимущественно в виде монолога преподавателя с применением мультимедийных презентаций. Требования к академической лекции: современный научный уровень и насыщенная информативность, убедительная аргументация, доступная и понятная речь, четкая структура и логика, наличие ярких примеров, научных доказательств, обоснований, фактов.

Лабораторное занятие – занятие, посвященное освоению конкретных умений и навыков и закреплению полученных на лекции знаний.

Консультации – групповые занятия, являющиеся одной из форм контроля самостоятельной работы студентов.

Для организации самостоятельной работы студентов и проведения текущего контроля успеваемости (в форме тестов и заданий) используются **дистанционные технологии** в виде электронного учебного курса (ЭУК) в системе Moodle ЯрГУ. В ЭУК сохраняются оценки, полученные учащимися в процессе изучения курса.

6. Перечень лицензионного и (или) свободно распространяемого программного обеспечения, используемого при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

При осуществлении образовательного процесса используются для формирования материалов для текущего контроля успеваемости и проведения промежуточной аттестации, для формирования методических материалов по дисциплине:

- операционные системы семейства Microsoft Windows;
- программы Microsoft Office;
- программа Adobe Acrobat Reader;
- браузеры Mozilla Firefox, Google Chrome.

7. Перечень современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (при необходимости)

1. NIST Chemistry WebBook. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>. База данных содержит информацию о термодинамических свойствах веществ, спектрах, константах двухатомных молекул и т.п.
2. NIST Chemical Kinetics Database. <https://kinetics.nist.gov/kinetics/>. База данных содержит информацию о константах скорости и энергиях активации элементарных реакций, протекающих в газовой фазе.
3. NIST Solution Kinetics Database. <https://kinetics.nist.gov/solution/>. База данных содержит информацию о константах скорости и энергиях активации элементарных реакций, протекающих в жидкой фазе.
4. Автоматизированная библиотечно-информационная система «БУКИ-NEXT» http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости), рекомендуемых для освоения дисциплины

а) основная литература

1. Черепанов, В.А. Химическая кинетика : учебное пособие для вузов / В.А. Черепанов, Т.В. Аксенова. – Москва : Издательство Юрайт, 2021. – 130 с. – (Высшее образование). – ISBN 978-5-534-10878-1. – Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. – URL: <https://urait.ru/bcode/473812>
2. Казин В.Н. Курс физической химии: учеб. пособие для вузов. / В.Н. Казин, Е.М. Плисс, А.И. Русаков; Учеб.-метод. Совет по биологии УМО по классическому университет. образованию; Яросл. гос. ун-т им. П.Г. Демидова – Ярославль: ЯрГУ, 2011. – 235 с. ISBN 978-5-8397-0787-0. <http://www.lib.uniyar.ac.ru/edocs/iuni/20100337.pdf>

б) дополнительная литература

1. Решение задач по физической химии: метод. указания. / сост. А.М. Гробов, Е.М. Плисс, А.В. Сирик, И.В. Тихонов; Яросл. гос. ун-т им. П.Г. Демидова, Науч.-метод. совет ун-та – Ярославль: ЯрГУ, 2010. – 45 с. <http://www.lib.uniyar.ac.ru/edocs/iuni/20100309.pdf>
2. Формальная кинетика: метод. указания. / сост. Е.М. Плисс, А.М. Гробов, А.В. Сирик, И.В. Тихонов, А.И. Русаков; Яросл. гос. ун-т им. П.Г. Демидова, Науч.-метод. совет ун-та – Ярославль: Б.и., 2009. – 54 с. <http://www.lib.uniyar.ac.ru/edocs/iuni/20090308.pdf>
3. Физическая химия: метод. указания к лабораторному практикуму. / сост. А.М. Гробов, В.Н. Казин, Е.М. Плисс, А.В. Сирик, И.В. Тихонов; Яросл. гос. ун-т им. П.Г. Демидова, Науч.-метод. совет ун-та – Ярославль: ЯрГУ, 2010. – 103 с. <http://www.lib.uniyar.ac.ru/edocs/iuni/20100303.pdf>
4. Тихонов И.В. Химическая кинетика [Электронный ресурс]: практикум. / И.В. Тихонов, А.В. Сирик, А.М. Гробов; Яросл. гос. ун-т им. П.Г. Демидова – Ярославль: ЯрГУ, 2020. – 48 с. <http://www.lib.uniyar.ac.ru/edocs/iuni/20200303.pdf>

в) ресурсы сети «Интернет»

1. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ (http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php).
2. Научная библиотека ЯрГУ им. П.Г. Демидова (доступ к лицензионным современным библиографическим, реферативным и полнотекстовым профессиональным базам данных и информационным справочным системам: реферативные базы данных Web of Science, Scopus; научная электронная библиотека eLIBRARY.RU; электронно-библиотечные системы Юрайт, Проспект, издательства «ЛАНЬ»; базы данных Polpred.com, «Диссертации РГБ (авторефераты)», ProQuest Dissertations and Theses Global; электронные

коллекции Springer; издательство Elsevier на платформе ScienceDirect; журналы Science (The American Association for the Advancement of Science (AAAS), Nature Publishing Group, Американского химического общества Core Package Web Edition (American Chemical Society – ACS) и др.) http://www.lib.uniyar.ac.ru/content/resource/net_res.php

3. Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" (<http://window.edu.ru/library>).

4. Учебные материалы по физической химии электронной библиотеки химического факультета МГУ <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/phys.html>:

- Еремин В.В., Каргов С.И., Кузьменко Н.Е. Задачи по физической химии. Часть 1. Химическая термодинамика (<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/eremin1/welcome.html>)

- Еремин В.В., Каргов С.И., Кузьменко Н.Е. Задачи по физической химии. Часть II. Химическая кинетика. Электрохимия

(<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/eremin/welcome.html>)

- Кубасов А.А. Химическая кинетика и катализ

(<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/kubasov/welcome.html>)

- Семиохин И.А. Сборник задач по химической термодинамике (часть I)

(<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/semiochin/part1.pdf>)

- Семиохин И.А. Сборник задач по химической термодинамике (часть II)

(<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/semiochin/part11.pdf>)

- Семиохин И.А. Сборник задач по химической кинетике

(<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/semiochin/kinetika1/all.pdf>)

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине включает в свой состав специальные помещения:

- учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа;
- учебные аудитории для проведения лабораторных работ;
- учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций;
- учебные аудитории для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации;
- помещения для самостоятельной работы;
- помещения для хранения и профилактического обслуживания технических средств обучения.

Специальные помещения укомплектованы средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории (ноутбук и/или персональный компьютер, мультимедиа-проектор, настенный проекционный экран).

Для проведения занятий лекционного типа предлагаются наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий, хранящиеся на электронных носителях и обеспечивающие тематические иллюстрации, соответствующие рабочей программе дисциплины.

Для проведения лабораторных работ используются: весы лабораторные, весы аналитические, учебно-лабораторный комплекс «Химия» (модуль "Универсальный контроллер" – 6 шт., модуль "Термический анализ" – 1 шт., модуль "Термостат" – 3 шт., модуль "Электрохимия" – 2 шт.), учебно-лабораторный комплекс «Физическая химия» (учебно-лабораторные модули "Кинетика", "Термодинамика", "Фазовое равновесие", "Электрохимия"), компьютеры.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации.

Число посадочных мест в лекционной аудитории больше либо равно списочному составу потока, а в аудитории для лабораторных работ – списочному составу группы обучающихся.

Авторы:

Директор института
фундаментальной и прикладной химии,
д.х.н., профессор


_____ Е.М. Плисс

Доцент института
фундаментальной и прикладной химии, к.х.н.


_____ И.В. Тихонов

**Приложение №1 к рабочей программе дисциплины
«Термодинамика и кинетика химических и биохимических процессов»**

**Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости
и промежуточной аттестации студентов по дисциплине**

**1. Типовые контрольные задания и иные материалы,
используемые в процессе текущего контроля успеваемости**

Задания для самостоятельной работы

Проверка выполнения осуществляется путем опроса и решения задач у доски в процессе лабораторных занятий.

Задания по теме № 1 «Термодинамика химических и биохимических процессов»

Раздел 1.1.

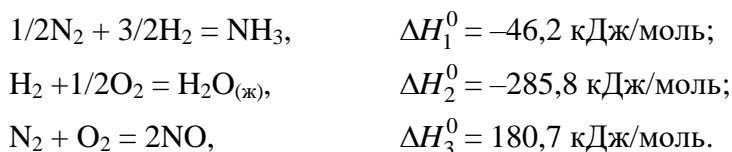
1. Приведите примеры изолированной, закрытой и открытой систем; равновесной и неравновесной систем; интенсивных и экстенсивных переменных. Какие из приведенных переменных являются функциями состояния системы?

2. Стандартная теплота сгорания метана равна $-890,3$ кДж/моль. Определите стандартную теплоту образования метана, если стандартные теплоты образования углекислого газа и жидкой воды равны $-393,5$ и $-285,8$ кДж/моль соответственно.

3. Молярная теплота испарения бензола при 273 К равна $32,7$ кДж/моль. Определите молярную теплоту испарения при 353 К, если средние удельные теплоемкости жидкого бензола и его паров в этом температурном интервале составляют $1,721$ и $1,248$ Дж/(г·К) соответственно.

4. 1 моль кислорода, взятый при 25°C и 1 атм, нагрет при постоянном давлении до удвоения объема. Молярная теплоемкость кислорода дается выражением: $C_p = 31,46 + 3,39 \cdot 10^{-3}T - 3,77 \cdot 10^{-5}/T^2$ Дж/(моль·К). Рассчитайте изменение внутренней энергии и энтальпии для этого процесса. Кислород можно считать идеальным газом.

5. Рассчитайте тепловой эффект реакции окисления аммиака кислородом до оксида азота (II) и воды в жидком состоянии при 298 К по значениям тепловых эффектов реакций:



6. Используя уравнение состояния и первый закон термодинамики, выведите уравнение адиабаты для газа Ван-дер-Ваальса.

7. Используя первый закон и определение теплоемкости, найдите разность изобарной и изохорной теплоемкостей для произвольной термодинамической системы.

Раздел 1.2.

1. Рассчитайте изменение энтропии при образовании 1 м^3 воздуха из азота и кислорода (объемная доля 20%) при температуре 25°C и давлении 1 атм.

2. Рассчитайте изменение энтропии при добавлении 200 г льда, находящегося при температуре 0°C , к 200 г воды (100°C) в изолированном сосуде. Удельная теплота плавления льда равна 335 Дж/г, удельная теплоемкость воды $4,184$ Дж/(г·К).

3. Рассчитайте изменение энтропии 1000 г воды в результате ее замерзания при $270,15$ К. Молярная теплота плавления льда при $273,15$ К равна 6008 Дж/моль. Удельные

теплоемкости льда и воды равны 2,12 и 4,18 Дж/(г·К), соответственно. Необратимый процесс замерзания переохлажденной воды представьте в виде суммы трех обратимых процессов: нагрев воды до 273,15 К, обратимое замерзание воды при 273,15 К и охлаждение льда до 270,15 К.

4. Определите зависимость энтропии от объема для термодинамической системы, которая описывается уравнением Ван-дер-Ваальса.

5. Запишите выражение для расчета абсолютной энтропии 1 моль воды при температуре 400°C и давлении 5 атм.

6. Внутренняя энергия некоторой системы известна как функция энтропии и объема, $U(S, V)$. Найдите температуру и теплоемкость этой системы.

Раздел 1.3.

1. Используя основное уравнение термодинамики, найдите зависимость внутренней энергии от объема при постоянной температуре: а) для произвольной системы; б) для идеального газа.

2. Энергия Гельмгольца одного моля некоторого вещества записывается следующим образом: $F = a + T(b - c - b \cdot \ln T - d \cdot \ln V)$, где a, b, c, d – константы. Найдите давление, энтропию и теплоемкость C_V этого тела. Дайте физическую интерпретацию константам a, b, d .

3. Для некоторой системы известна энергия Гиббса: $G(T, p) = aT(1 - \ln T) + RT \cdot \ln p - TS_0 + U_0$, где a, R, S_0, U_0 – постоянные. Найдите уравнение состояния $p(V, T)$ и зависимость $U(V, T)$ для этой системы.

4. Изменение энергии Гиббса в результате испарения воды при 95 °С и 1 атм равно 546 Дж/моль. Рассчитайте энтропию паров воды при 100 °С, если энтропия жидкой воды равна 87,0 Дж/(моль·К). При каком давлении изменение энергии Гиббса в результате испарения воды будет равно 0 при 95 °С?

5. Дана температурная зависимость константы равновесия реакции $\text{H}_2 + \text{Br}_{2(\text{г})} = 2\text{HBr}$. Найдите температурные зависимости величин $\Delta_r G_T^0$, $\Delta_r H_T^0$ и $\Delta_r S_T^0$ и определите их значения при 500 К.

$$\lg K_p = \frac{5153}{T} - 1,465 \cdot \lg T + 0,203 \cdot 10^{-3} T + \frac{0,075 \cdot 10^5}{T^2} + 5,31$$

6. Константа равновесия K_p реакции $\text{N}_2\text{O}_{4(\text{г})} = 2\text{NO}_{2(\text{г})}$ при 25°C равна 0,143. Рассчитайте давление, которое установится в сосуде объемом 1 л, в который поместили 1 г N_2O_4 при этой температуре.

7. Константа равновесия реакции $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} = \text{CO}_2 + \text{H}_2$ при 800 К равна 4,12. Смесь, содержащая 20% CO и 80% H_2O , нагрета до 800 К. Определите состав смеси при достижении равновесия и выход водорода, если взят 1 кг водяного пара.

8. При 1273 К и общем давлении 30 атм в равновесной смеси $\text{CO}_2 + \text{C}_{(\text{тв})} = 2\text{CO}$ содержится 17% (по объему) CO_2 . Сколько процентов CO_2 будет содержаться в газе при общем давлении 20 атм? При каком давлении в газе будет содержаться 25% CO_2 ?

Раздел 1.4.

1. Какие дополнительные (по отношению к трем «началам» классической равновесной термодинамики) постулаты используются в построении теории термодинамики неравновесных процессов?

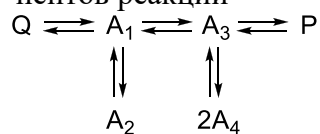
2. Когда применение методов термодинамики неравновесных процессов (т.е. кинетико-термодинамического анализа) является более предпочтительным, чем применение методов традиционного “чисто кинетического” описания? Почему?

3. Дать определение потоку термодинамического параметра и термодинамической силе, соответствующей этому потоку. Чему равна термодинамическая сила для диффузии вещества?

4. В чем смысл теоремы Пригожина о минимуме скорости производства энтропии? Каковы условия применимости этой теоремы?

5. Что называют диссипативными структурами? В чем заключается различие обычного стационарного состояния и диссипативной структуры?

6. Как соотносятся между собой химические потенциалы и концентрации для компонентов реакции



в стационарном процессе превращения исходного реагента Q в продукт P? A_1 – промежуточные соединения. Напишите для этой системы выражение для скорости производства энтропии. Применима ли для данной системы теорема Пригожина о минимуме скорости производства энтропии и если “да”, то при каких условиях?

7. Какими свойствами обладают коэффициенты взаимности Онзагера? Что можно сказать относительно значений коэффициентов Онзагера, учитывающих взаимовлияние теплопроводности и химических брутто-превращений в пространственно изотропной системе?

8. Для гомогенной изотермической системы написать уравнения Онзагера для трех взаимодействующих мономолекулярных реакций $A \rightleftharpoons B$; $A \rightleftharpoons C$; $A \rightleftharpoons D$. Объяснить смысл всех входящих в эти выражения величин и написать известные вам соотношения между ними. Как будут выглядеть эти уравнения, если концентрация компонента D является стационарной?

9. Биотехнологический синтез фермента АНД₈₀ осуществляется хорошо клонированным штаммом микроорганизмов в ходе процессов, сопряженных с реакцией ассимиляции глюкозы, которая характеризуется химическим сродством 42 кДж/моль. Оцените, с какой скоростью должна происходить ассимиляция глюкозы в замкнутом ферментере с температурой 37 °С, если скорость убывания энтропии в ферментере, за счет реакции синтеза фермента составляет 8 Дж/ч · К.

Задания по теме № 2 «Кинетика химических и биохимических процессов»

Раздел 2.1.

1. Как выражается скорость реакции синтеза аммиака $1/2N_2 + 3/2H_2 = NH_3$ через концентрации азота и водорода? Как изменится скорость реакции синтеза аммиака, если уравнение реакции записать в виде $N_2 + 3H_2 = 2NH_3$?

2. Чему равен порядок элементарных реакций: а) $Cl + H_2 = HCl + H$; б) $2NO + Cl_2 = 2NOCl$?

3. Какие из перечисленных величин могут принимать а) отрицательные; б) дробные значения: скорость реакции, порядок реакции, молекулярность реакции, константа скорости, стехиометрический коэффициент?

4. Превращение пероксида бензоила в диэтиловый эфир (реакция первого порядка) при 333 К прошло за 10 мин на 75,2 %. Вычислите константу скорости реакции и время полупревращения.

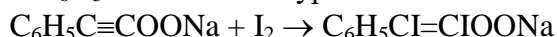
5. Константа скорости реакции $CH_3COOC_2H_5 + NaOH \rightarrow CH_3COONa + C_2H_5OH$ равна 7 л/(моль·мин). Вычислить долю (%) эфира, которое прореагирует за 5 мин, если а) исходные концентрации щелочи и эфира равны 0,05 моль/л; б) исходная концентрация щелочи 0,1 моль/л, а эфира 0,05 моль/л.

6. При гомогенно-каталитическом разложении перекиси водорода получены следующие данные:

$t \cdot 10^2, c$	0	5,00	8,40	12,84	19,50	31,08	39,30
$[H_2O_2], \text{ моль/л}$	0,350	0,227	0,160	0,110	0,061	0,025	0,0114

Определите порядок реакции и константу скорости.

7. При 298 К взаимодействуют эквивалентные количества иода и натриевой соли фенилпропиловой кислоты $C_6H_5C\equiv COONa$ по уравнению



За ходом реакции следили по убыванию концентрации иода, оттитровывая его периодически раствором гипосульфита натрия. Были проведены два опыта и получены следующие результаты:

Время, с	Опыт 1		Опыт 2	
	0	29	0	34,5
Объем $Na_2S_2O_3$, израсходованный на титрование 250 см ³ пробы, см ³	24,96	8,32	21,00	7,00

8. Вычислите порядок реакции для стадии, определяющей скорость пиролиза диборана B_2H_6 (г) при 373 К из следующих данных по скорости увеличения давления в системе как функции концентрации диборана:

$C(B_2H_6) \cdot 10^2$, моль/л	2,153	0,433
Скорость увеличения давления $\cdot 10^4$, моль/(л·ч)	7,4	0,73

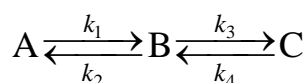
Раздел 2.2.

1. Образец радиоактивного урана массой 100 г распадается по схеме:



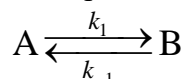
(над стрелкой указаны периоды полураспада). Рассчитайте массы нептуния и плутония через 20 дней после начала распада. Определите максимальную массу нептуния, которая может быть получена из данного образца урана.

2. Дана кинетическая схема:



Написать дифференциальные кинетические уравнения для изменения концентраций каждого из веществ, участвующих в реакции. Написать уравнение материального баланса системы. Рассчитать конечные концентрации каждого из веществ, если $[A]_0 = 1$ моль/л, $[B]_0 = [C]_0 = 0$, $k_1 = 10 \text{ мин}^{-1}$, $k_2 = 2 \text{ мин}^{-1}$, $k_3 = 1 \text{ мин}^{-1}$, $k_4 = 4 \text{ мин}^{-1}$.

3. Для обратимой реакции первого порядка

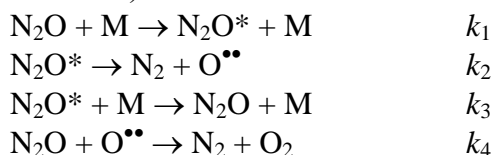


были получены следующие экспериментальные данные:

t , мин	0	20	∞
$[A]$, моль/л	0,88	0,40	0,24

Определить константы скоростей прямой и обратной реакций, если начальная концентрация вещества В равна нулю.

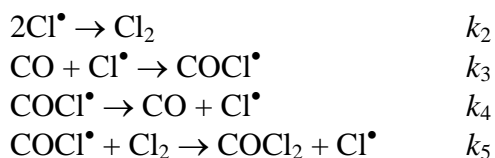
4. Химическая реакция $N_2O \rightarrow N_2 + 1/2O_2$ протекает по следующему механизму (М – инертная частица):



Считая концентрации N_2O^* и $O^{\bullet\bullet}$ стационарными, найдите выражение для скорости распада N_2O .

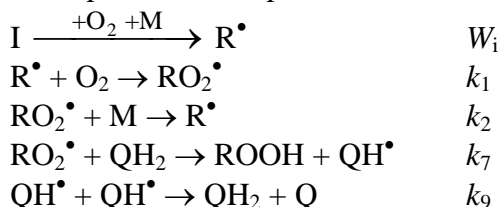
5. Реакция образования фосгена $CO + Cl_2 \rightarrow COCl_2$ может протекать по следующему механизму:





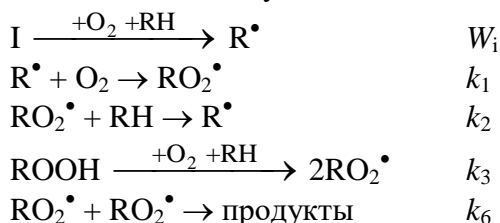
Используя метод стационарных концентраций, найдите выражение для скорости образования фосгена.

6. Механизм окисления стирола (M), ингибированного гидрохиноном (QH₂) при отсутствии квадратичного обрыва цепей описывается упрощенной схемой:



Выведите кинетическое уравнение для скорости процесса ингибированного окисления. Определите порядки реакции по стиrolу, гидрохинону, кислороду и инициатору.

7. Окисление кумола (RH) при 373 К протекает как вырожденно-разветвленный цепной процесс по механизму:



Выведите кинетическое уравнение для скорости накопления гидропероксида.

Раздел 2.3.

1. По значениям констант скоростей при двух температурах определить энергию активации, константу скорости при температуре T_3 и температурный коэффициент скорости реакции в уравнении Вант-Гоффа: $T_1 = 953$ К; $k_1 = 0,0183$ л/(моль·мин); $T_2 = 918$ К; $k_2 = 0,0038$ л/(моль·мин); $T_3 = 988$ К.

2. Дана зависимость константы скорости от температуры. Определите энергию активации, и константу скорости при температуре 70 °С.

$t, ^\circ\text{C}$	30	40	50	60
$k, \text{л}/(\text{моль}\cdot\text{с})$	5,7	11,3	21,2	37,0

3. Константа скорости бимолекулярной реакции $2\text{NO}_2 \rightarrow 2\text{NO} + \text{O}_2$ при 627 К равна $1,81 \cdot 10^3 \text{ см}^3/(\text{моль}\cdot\text{с})$. Вычислите истинную энергию активации и долю активных молекул, если диаметр молекулы NO_2 можно принять равным 3,55 А, а стерический множитель для этой реакции равен 0,019.

4. Вычислите значение стерического множителя в реакции димеризации этилена $2\text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_8$ при 300 К, если опытная энергия активации равна 146,4 кДж/моль, эффективный диаметр этилена равен 0,49 нм, а опытная константа скорости при этой температуре равна $1,08 \cdot 10^{-14} \text{ см}^3/(\text{моль}\cdot\text{с})$.

5. Используя теорию активированного комплекса, определите температурную зависимость константы скорости тримолекулярной реакции $2\text{NO} + \text{Cl}_2 = 2\text{NOCl}$ при температурах, близких к комнатной. Найдите связь между опытной и истинной энергиями активации.

6. Определите температурную зависимость константы скорости для реакции $\text{H}^\bullet + \text{Br}_2 \rightarrow \text{HBr} + \text{Br}^\bullet$ (нелинейный активированный комплекс) при низких и высоких температурах.

7. Для реакции $\text{CO} + \text{O}_2 = \text{CO}_2 + \text{O}$ зависимость константы скорости от температуры при низких температурах имеет вид: $k(T) \sim T^{3/2} \cdot \exp(-E_0/RT)$. Какую конфигурацию – линейную или нелинейную – имеет активированный комплекс?

Раздел 2.4.

1. Реакция разложения перхлората аммония (NH_4ClO_4) при 230–235 °С относится к автокаталитическим реакциям. Кинетика этого процесса описывается уравнением Праута–Томпкинса: $\ln \frac{\alpha}{1-\alpha} = \text{const} + kt$. Рассчитайте константу скорости этой реакции, если степень превращения перхлората аммония меняется во времени следующим образом:

t , мин	30,0	40,0	47,5	60,0	65,0
α	0,06	0,10	0,20	0,30	0,36

2. Для высокотемпературного разложения перхлората аммония предложено уравнение реакции: $2\text{NH}_4\text{ClO}_4 = \text{Cl}_2 + 4\text{H}_2\text{O} + 2\text{NO} + \text{O}_2$. Для описания кинетики высокотемпературного разложения может быть использовано уравнение Авраами–Ерофеева ($n = 1$): $1 - (1 - \alpha)^n = kt$. При температуре 440 °С константа скорости этой реакции равна $4,09 \cdot 10^{-27} \text{ мин}^{-1}$. Определите степень превращения перхлората аммония через 30 минут от начала реакции.

3. Константа скорости реакции полиморфного превращения $\alpha\text{-SiO}_2$ в высокотемпературные модификации при размере зерен 0,39 мкм определялась при разных температурах. Получено, что при $T_1 = 1573 \text{ К}$ константа скорости процесса равна $1,2 \cdot 10^{-4} \text{ мин}^{-1}$, а при $T_2 = 1673 \text{ К}$ – $6,0 \cdot 10^{-4} \text{ мин}^{-1}$. Определите значения предэкспоненциального множителя и энергии активации этого процесса; оцените область реагирования.

Раздел 2.5.

1. Химическая реакция $\text{CrCl}_2(\text{H}_2\text{O})_4^+(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CrCl}(\text{H}_2\text{O})_5^+(\text{aq}) + \text{Cl}^-(\text{aq})$ замедляется при увеличении концентрации ионов H^+ в среде. Наблюдаемая при этом эффективная константа скорости связана с константой скорости в отсутствие ионов H^+ соотношением: $k_{\text{эф}} = k + k_{\text{H}^+} C_{\text{H}^+}^{-1}$.

C_{HCl} , моль/л	0,200	0,861	1,005	4,196	8,000	9,953
$k_{\text{эф}} \cdot 10^3$, с ⁻¹	1,100	0,341	0,307	0,170	0,078	0,070

Используя экспериментальные данные, найдите постоянные k и k_{H^+} .

2. Реакция $\text{CH}_3\text{COCH}_3(\text{aq}) + \text{I}_2(\text{aq}) \rightarrow \text{CH}_3\text{COCH}_2\text{I}(\text{aq}) + \text{H}^+(\text{aq}) + \text{I}^-(\text{aq})$ протекает при температуре 293 К в кислой среде и относится к автокаталитическим химическим реакциям. Скорость этой реакции не зависит от концентрации I_2 . Начальная концентрация CH_3COCH_3 равна 0,683 моль/л. За ходом реакции следили по количеству ионов водорода (x), образовавшихся к моменту времени t . Получены следующие данные:

t , ч	24	46	65
$x \cdot 10^3$, моль/л	0,196	0,602	1,492

Экспериментально установлено, что изменение концентрации катализатора во времени можно описать уравнением: $\ln x = \ln C_{\text{H}^+}^0 + (C_{\text{CH}_3\text{COCH}_3}^0 + C_{\text{H}^+}^0)kt$. Определите кинетические характеристики этой автокаталитической реакции: $C_{\text{H}^+}^0$ и k . Рассчитайте $C_{\text{H}^+}^0$ к моменту времени $t = 150 \text{ ч}$.

3. Гидролиз ацетилхолина катализируется ферментом ацетилхолинэстеразой, число оборотов которой составляет 25000 с^{-1} . Сколько времени потребуется ферменту для расщепления одной молекулы ацетилхолина?

4. Для некоторой ферментативной реакции константа Михаэлиса равна 0,035 моль/л. Скорость реакции при концентрации субстрата 0,110 моль/л равна $1,15 \cdot 10^{-3} \text{ моль/(л·с)}$. Найдите максимальную скорость этой реакции.

5. При добавлении ингибитора в ферментативную систему, подчиняющуюся схеме Михаэлиса–Ментен, максимальная скорость реакции уменьшилась в 5 раз, а K_M не изменилась. Предложите схему ингибирования и рассчитайте K_I , если концентрация ингибитора равнялась $4 \cdot 10^{-5}$ моль/л.

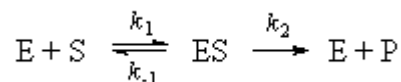
6. Начальная скорость окисления сукцината натрия в фумарат натрия под действием фермента сукциноксидазы измерена для ряда концентраций субстрата:

$C_S^0 \cdot 10^4$, моль/л	100,0	20,0	10,0	5,0	3,3
$W_I \cdot 10^6$, моль/(дм ³ ·с)	1,17	0,99	0,79	0,62	0,50

Определите константу Михаэлиса данной реакции.

7. При добавлении конкурентного ингибитора в ферментативную систему, подчиняющуюся схеме Михаэлиса–Ментен ($K_M = 3,0 \cdot 10^{-3}$ моль/л), скорость реакции уменьшилась на 70 %. Концентрация субстрата равна $2,5 \cdot 10^{-3}$ моль/л, концентрация ингибитора – $5,0 \cdot 10^{-4}$ моль/л. При какой концентрации субстрата скорость реакции составит 35% от исходной, при той же концентрации ингибитора?

8. В некоторых случаях кинетические исследования ферментативных реакций проводят в условиях избытка фермента. Выведите уравнение Михаэлиса-Ментен, описывающее зависимость начальной скорости ферментативной реакции от начальных концентраций фермента и субстрата в системе



при условии, что концентрация фермента намного больше концентрации субстрата.

Примеры заданий к контрольным работам

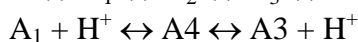
Контрольная работа №1

1. Энтальпия сгорания глюкозы при 25°C равна -2816 кДж/моль. Рассчитайте энтальпию образования глюкозы из простых веществ.

2. Один моль O_2 ($C_p = 29,36$ Дж/(моль·К), $S_{298}^0 = 205,03$ Дж/(моль·К)) нагревают от 298 до 500 К при $P = 1$ атм. Вычислите изменение энергии Гиббса в этом процессе.

3. Константа равновесия газофазной реакции изомеризации борнеола ($C_{10}H_{17}OH$) в изоборнеол равна 0,106 при 503 К. Смесь 7,5 г борнеола и 14,0 г изоборнеола поместили в сосуд объемом 5 л и выдерживали при 503 К до достижения равновесия. Рассчитать мольные доли и массы борнеола и изоборнеола в равновесной смеси.

4. Как соотносятся между собой химические потенциалы и концентрации компонентов реакции в стационарном процессе превращения исходного реагента R в продукт P в процессе, изображенном схемой



Здесь A_i – промежуточные соединения, H^+ – протон из растворителя. Напишите для этой системы выражение для скорости производства энтропии. Как формулируется для данной системы теорема Пригожина о скорости производства энтропии в стационарном состоянии? В какой мере применима эта теорема для данной системы при температуре 1200 К, если сродство брутто-реакции $R \rightarrow P$ равно 2 кДж/моль? 50 кДж/моль?

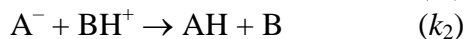
Контрольная работа №2

1. Известно, что некоторая реакция имеет дробный порядок по веществу A. При определении концентрации вещества A в ходе реакции были получены следующие данные:

t, мин	0	5	10	20	30	40
[A], моль/л	0,723	0,641	0,563	0,421	0,303	0,205

Определите порядок реакции, используя зависимость текущей скорости реакции от концентрации вещества А.

2. Конденсация ацетона $(\text{CH}_3)_2\text{CO}$ в водном растворе катализируется основаниями, которые обратимо реагируют с ним с образованием карбаниона $\text{C}_3\text{H}_5\text{O}^-$. Карбанион реагирует с молекулой ацетона и дает продукт реакции. Упрощенный механизм выглядит так:



Используя метод стационарных концентраций, найдите концентрацию карбаниона и выведите уравнение для скорости образования продукта.

3. Вычислите значение стерического множителя в реакции димеризации этилена при 300 К, если опытная энергия активации равна 146,4 кДж/моль, эффективный диаметр этилена равен 0,49 нм, а опытная константа скорости при этой температуре равна $1,08 \cdot 10^{-14} \text{ см}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$.

4. Начальная скорость окисления сукцината натрия в фумарат натрия под действием фермента сукциноксидазы была измерена для ряда концентраций субстрата:

[S], моль/л	0,01	0,002	0,001	0,0005	0,00033
$W \cdot 10^6$, моль/(л·с)	1,17	0,99	0,79	0,62	0,50

Определите константу Михаэлиса данной реакции.

Критерии оценивания результатов текущего контроля успеваемости

Форма текущего контроля успеваемости	Правила выставления оценки
Опрос	<ul style="list-style-type: none"> - <i>Отлично</i> выставляется за полный ответ на поставленный вопрос с включением в содержание ответа рассказа (лекции) преподавателя, материалов учебников, дополнительной литературы без наводящих вопросов. - <i>Хорошо</i> выставляется за полный ответ на поставленный вопрос в объеме рассказа (лекции) преподавателя с включением в содержание ответа материалов учебников с четкими положительными ответами на наводящие вопросы преподавателя. - <i>Удовлетворительно</i> выставляется за ответ, в котором озвучено более половины требуемого материала, с положительным ответом на большую часть наводящих вопросов. - <i>Неудовлетворительно</i> выставляется за ответ, в котором озвучено менее половины требуемого материала или не озвучено главное в содержании вопроса с отрицательными ответами на наводящие вопросы, или обучающийся отказался от ответа без предварительного объяснения уважительных причин.
Решение задач	<ul style="list-style-type: none"> - <i>Отлично</i> выставляется, если задание выполнено полностью. - <i>Хорошо</i> выставляется, если задание выполнено полностью с незначительными ошибками. - <i>Удовлетворительно</i> выставляется, если обучающийся приступил к выполнению задания, наметил алгоритм решения, но допустил серьезные ошибки на этапах решения. - <i>Неудовлетворительно</i> выставляется, если обучающийся не приступал к выполнению задания или не смог выработать алгоритм его решения.

Контрольная работа	<ul style="list-style-type: none"> - <i>Отлично</i> выставляется, если обучающийся выполнил работу (общий процент выполнения заданий не менее 90%), демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме работы, даёт правильный алгоритм решения. - <i>Хорошо</i> выставляется, если обучающийся выполнил работу с небольшими недочетами (общий процент выполнения заданий не менее 70%), демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме работы, допуская незначительные неточности при их применении и выборе алгоритма решения. - <i>Удовлетворительно</i> выставляется, если обучающийся в целом выполнил работу (общий процент выполнения заданий не менее 50%), допуская существенные недочеты, в том числе при выборе алгоритма решения. - <i>Неудовлетворительно</i> выставляется, если обучающийся не справился с выполнением задания (общий процент выполнения заданий менее 50%), не смог выбрать алгоритм его решения, продемонстрировав существенные пробелы в знаниях основного учебного материала.
Лабораторная работа	<ul style="list-style-type: none"> - <i>Отлично</i> выставляется, если обучающийся имеет глубокие знания учебного материала по теме лабораторной работы, показывает усвоение взаимосвязи основных понятий используемых в работе, смог ответить на все уточняющие и дополнительные вопросы, демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме лабораторной работы, определяет взаимосвязи между показателями задачи, даёт правильный алгоритм решения, определяет междисциплинарные связи по условию задания. - <i>Хорошо</i> выставляется, если обучающийся показал знание учебного материала, усвоил основную литературу, смог ответить почти полно на все заданные дополнительные и уточняющие вопросы. Обучающийся демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме лабораторной работы, допуская незначительные неточности при решении задач, имея неполное понимание междисциплинарных связей при правильном выборе алгоритма решения задания. - <i>Удовлетворительно</i> выставляется, если обучающийся в целом освоил материал лабораторной работы, ответил не на все уточняющие и дополнительные вопросы, обучающийся затрудняется с правильной оценкой предложенной задачи, даёт неполный ответ, требующий наводящих вопросов преподавателя, выбор алгоритма решения задачи возможен при наводящих вопросах преподавателя. - <i>Неудовлетворительно</i> выставляется обучающемуся, если он имеет существенные пробелы в знаниях основного учебного материала лабораторной работы, который полностью не раскрыл

Фонды оценочных средств по дисциплине предусматривают проверку индикаторов достижения компетенций.

2. Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации

Список вопросов к экзамену

1. Виды термодинамических систем. Типы термодинамических процессов.
2. Первое начало термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия. Применимость первого начала термодинамики к биологическим процессам.
3. Термохимия. Закон Гесса и следствие из него.
4. Второе начало термодинамики. Термодинамическая вероятность. Статистическая природа второго начала.
5. Характеристические функции. Изолированные системы. Энтропия. Связь энтропии с термодинамической вероятностью. Применимость второго начала к биологическим системам.
6. Неизолированные системы. Свободная энергия Гельмгольца и свободная энергия Гиббса. Максимально полезная работа.
7. Уравнение Гиббса-Гельмгольца. Химическое равновесие.
8. Стационарное состояние и термодинамическое равновесие. Термодинамический критерий стационарного состояния. Теорема Пригожина. Парадокс Максвелла.
9. Потoki и их взаимодействие вблизи термодинамического равновесия. Соотношение взаимности Онсагера. Биологическое значение сопряжения потоков. Классификация видов энергии по Бриллюэну.
10. Диссипативная функция. Диссипативные структуры. Реакция Белоусова-Жаботинского.
11. Кинетика химических реакций. Задачи химической кинетики.
12. Классификация химических реакций.
13. Скорость химической реакции. Закон действия масс. Константа скорости, порядок, молекулярность.
14. Простые реакции. Кинетические уравнения реакций первого-третьего порядка.
15. Методы определения порядка реакции.
16. Кинетика сложных реакций. Параллельные, обратимые и последовательные реакции.
17. Кинетика сопряженных реакций. Расчет кинетики сложных реакций по методу квазистационарных концентраций Боденштейна-Семенова.
18. Цепные реакции. Общая характеристика и кинетические особенности неразветвленных цепных реакций.
19. Разветвленные цепные реакции. Цепные реакции в жизнедеятельности организма.
20. Влияние температуры на скорость реакции. Правило Вант-Гоффа. Уравнение Аррениуса. Энергия активации.
21. Теория активных соударений. Модель элементарного акта взаимодействия. Стерический фактор.
22. Теория переходного состояния. Поверхность потенциальной энергии. Расчет константы скорости по теории переходного состояния. Физический смысл предэкспоненциального множителя.
23. Кинетика гетерогенных процессов. Кинетическая и диффузионная области. Законы Фика. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных процессов.
24. Кинетика гомогенно-каталитических процессов. Кислотно-основной катализ.
25. Кинетика ферментативных процессов. Уравнение Михаэлиса-Ментен. Константа Михаэлиса.
26. Изменение энергии и энтропии активации в ферментативной реакции. Механизмы ферментативного катализа. Электронно-релаксационные взаимодействия в ферментативном катализе.

Оценка ответа на экзамене по билетам

Показатели	Критерии
Ответы по вопросам билета	<ul style="list-style-type: none">– Содержание ответа соответствует поставленному вопросу– Раскрываются наиболее значимые факты, научные положения,– Соблюдается логическая последовательность в изложении материала
Ответы на дополнительные вопросы	<ul style="list-style-type: none">– Содержание ответа соответствует поставленному вопросу– Раскрываются наиболее значимые факты, научные положения,– Соблюдается логическая последовательность в изложении материала

Шкала оценивания: 0 баллов – полное отсутствие критерия; 1 балл – частичное выполнение критерия; 2 балла – полное выполнение критерия

Оценка проставляется по количеству набранных баллов:

менее 60% от максимально возможного количества баллов – *неудовлетворительно*,

60-75% от максимально возможного количества баллов – *удовлетворительно*,

76-85% от максимально возможного количества баллов – *хорошо*,

86-100% от максимально возможного количества баллов – *отлично*.

Приложение №2 к рабочей программе дисциплины «Термодинамика и кинетика химических и биохимических процессов»

Методические указания для студентов по освоению дисциплины

Основной формой изложения учебного материала по дисциплине «Термодинамика и кинетика химических и биохимических процессов» являются лекции с применением презентаций. Это связано с тем, что изучаемый курс содержит большое количество уравнений, формул и схем. Лекционный курс предоставляется студенту в электронном виде. Вместе с тем необходимо учитывать, что в ходе лекции многие примеры разбираются и иллюстрируются преподавателем на доске. Без конспектирования данных записей невозможно освоить курс в полном объеме.

Полученные на лекциях теоретические знания закрепляются и применяются на практике на лабораторных занятиях, посвященных исследованию кинетики и механизма химических процессов. Защита отчетов по лабораторным работам является одним из неотъемлемых этапов изучения курса.

Практические занятия в рамках данного курса не предусмотрены, поэтому разбор и решение основных расчетных задач происходит частично в рамках лекций, и в большем объеме – в рамках лабораторных занятий. При решении задач происходит закрепление лекционного материала путем применения его к конкретным задачам дисциплины. Основная цель решения задач – помочь усвоить способы обработки результатов эксперимента по исследованию термодинамики и кинетики химических процессов. В процессе изучения дисциплины рекомендуется регулярное повторение пройденного лекционного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо дома еще раз прорабатывать и при необходимости дополнять информацией, полученной на консультациях, лабораторных занятиях или из учебной литературы. Большое внимание должно быть уделено выполнению домашней работы. В качестве заданий для самостоятельной работы дома студентам предлагаются вопросы, аналогичные разобранным на лекциях или немного более сложные, которые являются результатом объединения нескольких базовых задач. Освоить вопросы, излагаемые в процессе изучения дисциплины самостоятельно студенту крайне сложно, поэтому посещение всех аудиторных занятий является совершенно необходимым.

Для проверки и контроля усвоения теоретического материала и приобретенных практических навыков в течение обучения проводятся мероприятия текущей аттестации в виде контрольной работы и защиты лабораторных работ. Также проводятся консультации (при необходимости) по разбору заданий для самостоятельной работы, которые вызвали затруднения. В конце семестра студенты сдают экзамен, допуск к которому осуществляется при условии успешного прохождения всех мероприятий текущей аттестации.

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов по дисциплине

В качестве учебно-методического обеспечения рекомендуется использовать литературу, указанную в разделе 8 данной рабочей программы.

Также в процессе изучения дисциплины рекомендуется использовать широкий спектр интернет-ресурсов:

1. Учебные материалы по физической химии электронной библиотеки химического факультета МГУ (<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/phys.html>). Данный сайт содержит учебные пособия и методические указания, из которых наиболее полезными в рамках данного курса являются:

Еремин В.В., Каргов С.И., Кузьменко Н.Е. Задачи по физической химии. Часть 1. Химическая термодинамика (<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/eremin1/welcome.html>)

Еремин В.В., Каргов С.И., Кузьменко Н.Е. Задачи по физической химии. Часть II. Химическая кинетика. Электрохимия

(<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/eremin/welcome.html>)

Кубасов А.А. Химическая кинетика и катализ

(<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/kubasov/welcome.html>)

Семиохин И.А. Сборник задач по химической термодинамике (часть I)

(<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/semiochin/part1.pdf>)

Семиохин И.А. Сборник задач по химической термодинамике (часть II)

(<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/semiochin/part11.pdf>)

Семиохин И.А. Сборник задач по электрохимии

(<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/semiochin/elektrochimia/all.pdf>)

Семиохин И.А. Сборник задач по химической кинетике

(<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/semiochin/kinetika1/all.pdf>)

2. NIST Chemistry WebBook (<http://webbook.nist.gov/chemistry>) База данных содержит сведения об экспериментальных термодинамических свойствах веществ, а также о константах скорости большого количества элементарных реакций.

3. Сайты издательств научных журналов и базы данных:

eLibrary.ru – Электронная научная библиотека (<http://elibrary.ru/>)

Портал издательства RSC Publishing (<http://pubs.rsc.org/>)

Портал издательства ACS Publications (<http://pubs.acs.org/>)

Портал Wiley Online Library (<http://onlinelibrary.wiley.com/>)

Портал Sciencedirect (<http://www.sciencedirect.com/>)

Портал издательства Annual Reviews (<http://www.annualreviews.org/>)

Портал SpringerLink (<http://springerlink.com/chemistry-and-materials-science/journals/>)

Портал издательства Taylor & Francis Group (<http://www.informaworld.com/>)

Портал издательства Science (<http://www.sciencemag.org/journals/>)

Портал издательства Nature (<http://www.nature.com/nature/index.html>)

База данных ВИНТИ РАН

(http://www2.viniti.ru/index.php?option=com_content&task=view&id=23&Itemid=100)

База данных NIST Chemistry WebBook (<http://webbook.nist.gov/chemistry/>)

База данных ChemSpider (<http://chemspider.com>)

4. Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" (<http://window.edu.ru/library>).

Целью создания информационной системы "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" (ИС "Единое окно ") является обеспечение свободного доступа к интегральному каталогу образовательных интернет-ресурсов и к электронной библиотеке учебно-методических материалов для общего и профессионального образования.

Полезными для самостоятельной работы являются следующие издания, представленные в библиотеке этого сайта:

Кравченко Т.А., Введенский А.В., Козадеров О.А. Сборник примеров и задач по физической химии. Химическая термодинамика (часть I). – Воронеж: Изд-во ВГУ, 2002. – 64 с. <http://window.edu.ru/resource/481/27481>

(Сборник содержит фундаментальные положения и уравнения, необходимые для понимания и решения задач по химической термодинамике. В нем приведено большое количество примеров с подробным изложением хода решения задач. Даны наиболее типичные задачи и ответы на них по термохимии и термодинамическим потенциалам химических процессов (часть I), термодинамике растворов, фазовым и химическим равновесиям (часть II). Задания, включенные в настоящий сборник, апробированы на кафедре физической химии Воронежского государственного университета.)

Кравченко Т.А., Введенский А.В., Козадеров О.А. Сборник примеров и задач по физической химии. Химическая термодинамика (часть II). – Воронеж: Изд-во ВГУ, 2002. – 67 с. <http://window.edu.ru/resource/481/27481>

(Сборник содержит фундаментальные положения и уравнения, необходимые для понимания и решения задач по химической термодинамике. В нем приведено большое количество примеров с подробным изложением хода решения задач. Даны наиболее типичные задачи и ответы на них по термохимии и термодинамическим потенциалам химических процессов (часть I), термодинамике растворов, фазовым и химическим равновесиям (часть II). Задания, включенные в настоящий сборник, апробированы на кафедре физической химии Воронежского государственного университета.)

Пурмаль А.П. Химическая кинетика: Учебное пособие. – М.: МФТИ, 2000. – 80 с. <http://window.edu.ru/resource/020/39020>

(В учебном пособии рассмотрены основные понятия и определения эмпирической кинетики, методы определения порядков реакций и констант скорости реакций различных типов в закрытых и открытых системах. Описаны методы изучения быстрых реакций. Рассмотрены типы химических частиц и их характерные реакции. Задачи и вопросы, сопровождающие каждый раздел, рекомендуются для самопроверки и проработки на семинарских занятиях по курсу "Основы химической физики". Учебное пособие адресовано студентам 3 курса (5 семестр) факультета молекулярной и биологической физики Московского физико-технического института.)

Смородинов В.С., Логинова О.Н., Стась И.Е. Физическая химия. Решение обратных задач химической кинетики методом изменения давления. – Барнаул: Алтайский гос. ун-т, 2002. – 19 с. <http://window.edu.ru/resource/642/29642>

(Методические указания к практическим и семинарским занятиям включают индивидуальные расчетные задания по химической кинетике, вывод кинетических уравнений и кинетические особенности реакций распада и присоединения. Предназначены для самостоятельной работы студентов 3-4 курсов по специальности 011000 "Химия".)

Колпакова Н.А. Сборник задач по химической кинетике / Н.А. Колпакова, С.В. Романенко, В.А. Колпаков. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2008. – 280 с. <http://window.edu.ru/resource/675/75675>

(Пособие подготовлено на кафедре физической и аналитической химии Томского политехнического университета и содержит более 40 примеров задач с решениями и более 400 задач для самостоятельного решения по разделам "Кинетика химических реакций" и "Катализ" в курсе физической химии. Сборник предназначен для студентов химических специальностей вузов.)

Для самостоятельного подбора литературы в библиотеке ЯрГУ рекомендуется использовать:

1. Личный кабинет (http://lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_login.php) дает возможность получения on-line доступа к списку выданной в автоматизированном режиме литературы, просмотра и копирования электронных версий изданий сотрудников университета (учеб. и метод. пособия, тексты лекций и т.д.) Для работы в «Личном кабинете» необходимо зайти на сайт Научной библиотеки ЯрГУ с любой точки, имеющей доступ в Internet, в пункт меню «Электронный каталог»; пройти процедуру авторизации, выбрав вкладку «Авторизация», и заполнить представленные поля информации.

2. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ (http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php) содержит более 2500 полных текстов учебных и учебно-методических материалов по основным изучаемым дисциплинам, изданных в университете. Доступ в сети университета, либо по логину/паролю.

3. Электронная картотека «Книгообеспеченность» (http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_bookreq_find.php) раскрывает учебный фонд научной библиотеки ЯрГУ, предоставляет оперативную информацию о состоянии книгообеспеченности дисциплин основной и дополнительной литературой, а также цикла дисциплин и специальностей. Электронная картотека «Книгообеспеченность» доступна в сети университета и через Личный кабинет.